

Verbrennung in Wandnähe: Numerische Analyse von Phänomenen und Modellentwicklung

Dem Fachbereich Maschinenbau
an der Technischen Universität Darmstadt
zur

Erlangung des Grades eines Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.)
genehmigte

D i s s e r t a t i o n

vorgelegt von

Sebastian Ganter, M. Sc.

aus Freiburg

Berichterstatter:	Prof. Dr.-Ing. J. Janicka
Mitberichterstatter:	Prof. Dr. rer. nat. M. Schäfer
Tag der Einreichung:	22.01.2019
Tag der mündlichen Prüfung:	16.04.2019

Darmstadt 2019

D17

Ganter, Sebastian:

Verbrennung in Wandnähe: Numerische Analyse von Phänomenen und Modellentwicklung
Darmstadt, Technische Universität Darmstadt,

Jahr der Veröffentlichung der Dissertation auf TUpriints: 2019

URN: urn:nbn:de:tuda-tuprints-87294

Tag der mündlichen Prüfung: 16.04.2019

Veröffentlicht unter CC BY 4.0 International

<https://creativecommons.org/licenses/>

Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Arbeit, abgesehen von den in ihr ausdrücklich genannten Hilfen, selbstständig verfasst habe.

Datum, Unterschrift

Vorwort

Diese Arbeit entstand während meiner Zeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Energie- und Kraftwerkstechnik der Technischen Universität Darmstadt.

Mein besonderer Dank gilt daher dem Institutsleiter Herrn Professor Dr.-Ing. Johannes Janicka für das Vertrauen in meine Person und die Möglichkeit, diese Arbeit durchzuführen. Insbesondere möchte ich mich für die mir zugestandenen Freiheiten bei der Umsetzung meiner Arbeit und die hervorragenden Rahmenbedingungen bedanken, welche die Vollen-
dung der Arbeit in der angestrebten Zeit ermöglichten. Weiterhin danke ich Professor Dr.
rer. nat. Michael Schäfer für die Übernahme des Korreferats.

Meinen Kollegen an den Fachgebieten EKT, RSM und STFS möchte ich mich herzlich bedanken für die großartige Arbeitsatmosphäre und die Unterstützung, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Besonders erwähnen möchte ich hierbei Dr.-Ing. Guido Künne für seine herausragende Hilfsbereitschaft seine inspirierende Kritik. Weiterhin möchte ich Robert Knappstein, Thorsten Meier, Amer Advic und Hendrik Nicolai für die Unterstützung meiner Arbeit durch anregende Diskussionen und Erfahrungsaustausch danken.

Professor Dr. rer. nat. Andreas Dreizler möchte ich für die konstruktive Zusammenarbeit und Bereitstellung experimenteller Daten danken.

Weiterhin danke ich meinem Vater Dieter, welcher meine Begeisterung für die Naturwissenschaften und Technik weckte und förderte, sowie meinen Schwiegereltern Zhi und Ansgar, welche mir zu jeder Zeit mit Rat und Tat zur Seite standen.

Mein besonderer Dank gilt auch meiner Frau Wei Wei und meinem Sohn Konstantin, welche mich häufig entbehren mussten.

Sebastian Ganter

Darmstadt, den 23. April 2019

Für meinen Sohn Konstantin

Das Gefühl ist ein Meer, der Gedanke ein Teich.

(Manfred Hinrich)

Inhaltsverzeichnis

Nomenklatur	ix
1 Einleitung	1
1.1 Hintergrund	1
1.2 Motivation der Arbeit	2
1.3 Stand der Wissenschaft	2
1.3.1 Chemiereduktion	2
1.3.2 Flamme-Wand-Interaktion	3
1.4 Ziele und Rahmen dieser Arbeit	5
1.5 Struktur der Arbeit	6
2 Mathematische und numerische Beschreibung von reagierenden Strömungen	7
2.1 Theoretische Grundlagen	7
2.1.1 Die Erhaltungsgleichung der Masse	8
2.1.2 Die Erhaltungsgleichung des Impulses	8
2.1.3 Die Erhaltungsgleichung des Stoffmassenbruchs	8
2.1.4 Die Erhaltungsgleichung der Enthalpie	9
2.1.5 Die thermische Zustandsgleichung für Strömungen bei geringer Mach-Zahl	10
2.1.6 Diffusionsbehandlung	11
2.1.7 Wärmeleitfähigkeit	13
2.1.8 Die Speziestransportgleichung im Zustandsraum	14
2.2 Numerische Behandlung	16
2.2.1 Räumliche Diskretisierung des Rechengebiets	17
2.2.2 Diskretisierung der Transportgleichungen	17
2.2.2.1 Konvektive Flüsse	19
2.2.2.2 Diffusive Flüsse	20
2.2.3 Zeitliche Diskretisierung	21
2.2.4 Druckkorrekturverfahren	22
2.2.5 Randbedingungen	24
2.2.5.1 Die Einlassrandbedingungen	24
2.2.5.2 Die Auslassrandbedingungen	25
2.2.5.3 Wände und Symmetrierandbedingungen	25

3	Mathematische Beschreibung der Verbrennungschemie	26
3.1	Chemische Reaktionen	26
3.1.1	Flammentypen	28
3.1.1.1	Diffusionsflammen	29
3.1.1.2	Vormischflammen	30
3.2	Detaillierte Chemie	31
3.2.1	Berechnung chemischer Quellterme	31
3.2.2	Chemiemechanismen	32
3.2.3	Implementierung des Soret-Effekts	32
3.3	Chemiereduktion unter Verwendung des FGM-Ansatzes	34
3.4	Chemiereduktion unter Verwendung des REDIM-Ansatzes	35
4	Untersuchung wandnaher Verbrennung	37
4.1	Idealisierte Formen des Flammenverlöschens	37
4.2	Turbulenz	38
4.2.1	Einfluss der Turbulenz auf die Flamme-Wand-Interaktion	40
4.3	Analyse der Head-on-quenching-Konfiguration	42
4.3.1	Experimenteller Hintergrund	42
4.3.2	Numerische Konfigurationen und Simulationsparameter	44
4.3.3	Ergebnisse	47
4.4	Senkrechtes Flammenverlöschens (sidewall quenching) [27]	50
4.4.1	Der SWQ-Brenner	51
4.4.2	Die numerische Konfiguration	53
4.4.3	Definition des flammenfesten Koordinatensystems	55
4.4.4	Ergebnisse	57
4.4.4.1	Der thermochemische Zustand in Wandnähe	57
4.4.4.2	Beschreibung der Lagrange'schen Analysemethode anhand eines 1D-Beispiels	61
4.4.4.3	Anwendung der Lagrange'schen Analysemethode auf das SWQ-Szenario	63
4.5	Zusammenfassung	67
5	Modellentwicklung	69
5.1	Analyse der FGM und der REDIM [28]	69
5.1.1	Die FGM-Tabellenerzeugung	70
5.1.2	Analyse der Fehlersystematik der FGM	71
5.1.3	Analyse der REDIM	74
5.1.3.1	Direkte Tabellierung der Detaillierten-Chemie-Ergebnisse	75
5.1.3.2	Bewertung der REDIM im Kontext der wandnahen Ver- brennung	75
5.1.4	Zusammenfassung	80
5.2	Vorbetrachtungen zur Entwicklung des Tabellierungskonzeptes	81
5.2.1	Numerisches Lösen der transformierten Speziestransportgleichung	82
5.2.2	Ergebnisse und Schlussfolgerungen für die Entwicklung des Tabel- lierungskonzeptes	82

5.3	Entwicklung der dreidimensionalen HOQEGR-Chemie-Tabelle	84
5.3.1	Konzeptionierung	85
5.3.1.1	Zusammenfassung bisheriger Erkenntnisse und Zielsetzung im Hinblick auf die Tabellenentwicklung	85
5.3.1.2	Festlegung der Erzeugungskonfigurationen	86
5.3.1.3	Auswahl der Kontrollvariablen	88
5.3.2	Tabellenerzeugung	89
5.3.2.1	Erzeugung chemischer Zustände	89
5.3.2.2	Hierarchische Normierung der Kontrollvariablen und Ge- staltung des Tabellenzugriffs	92
5.3.3	Basisverifikation	97
5.3.3.1	Die HOQ-Tabelle	97
5.3.3.2	Verifikationsfall I: Frei propagierende Flamme	98
5.3.3.3	Verifikationsfall II: Head-on quenching	99
5.3.4	Anwendung der HOQEGR-Tabelle auf die SWQ-Konfiguration . . .	101
5.3.4.1	Ergebnisse	101
5.3.4.2	Analyse	104
6	Zusammenfassung und Ausblick	109
A	Transformation der Speziestransportgleichung in den Zustandsraum	112
B	Konzeptskizze des Optimierungsproblems zur Bestimmung der Kon- trollvariablen	116
	Literaturverzeichnis	117

Nomenklatur

Einheiten, welche sich aus dem lokalen Kontext ergeben, werden mit \mathcal{U} gekennzeichnet.

Lateinische Großbuchstaben		Unit
A_{fr}	Preexponentieller Faktor des Arrhenius-Gesetzes	\mathcal{U}
\mathcal{C}	Courant-Zahl	—
D	Diffusiver Anteil des Massenbruchs	—
\mathcal{D}	Diffusionszahl	—
\mathcal{D}_k	Diffusionskoeffizient der Komponente k	m^2/s
\mathcal{D}_{kj}	Diffusionskoeffizient der Komponente k in die reine Komponente j	m^2/s
\mathcal{D}_k^T	Thermodiffusionskoeffizient der Komponente k	kg/ms
E_{a}	Aktivierungsenergie	J/mol
$F(\xi)$	Empirische Korrekturfunktion zur Berechnung des binären Thermodiffusionsfaktors	—
\mathcal{L}	Charakteristische Längenskala	m
\mathcal{M}	Molare Masse der Mischung	kg/kmol
\mathcal{M}_k	Molare Masse der Spezies k	kg/kmol
N_{r}	Anzahl der Reaktionen	—
N_{s}	Anzahl der Spezies	—
Q	Reaktiver Anteil des Massenbruchs	—
\dot{Q}	Externe Quelle oder Senke der Enthalpie	$\text{J}/\text{m}^3 \text{s}$
\mathcal{R}	Ideale Gaskonstante	$\text{J}/\text{kmol K}$
\mathcal{R}	Allgemeine Recht-Hand-Seite	\mathcal{U}
S	Allgemeine Oberfläche	m^2
T	Temperatur	K
T^*	Reduzierte Temperatur	K
\mathcal{U}	Charakteristische Geschwindigkeit	m/s
V	Allgemeines Volumen	m^3
$V_{k,i}$	Diffusionsgeschwindigkeit der Komponente k in Richtung von i	m/s

X_k	Molenbruch der Spezies k	—
\mathcal{X}_k	Symbol der Spezies k	—
Y_k	Massenbruch der Spezies k	—
\mathcal{Y}	Reaktionsfortschrittsvariable	—
Z_k	Elementmassenbruch des Elements k	—

Lateinische Kleinbuchstaben	Unit
-----------------------------	------

a	Dehnungsgeschwindigkeit (Gegenstromkonfiguration)	$1/\text{s}$
c	Schallgeschwindigkeit	m/s
c_k	Molare Konzentration der Spezies k	mol/m^3
c_p	Spezifische Wärmekapazität der Mischung bei konstantem Druck	$\text{J}/\text{kg K}$
c_{pk}	Spezifische Wärmekapazität der Spezies k bei konstantem Druck	$\text{J}/\text{kg K}$
f	Mischungsgrad	—
$f_{k,i}$	Volumenkraft die auf Spezies k in Richtung i wirkt	m/s^2
g_i	Erdbeschleunigung in Richtung i	m/s^2
g_n	Normierte Hilfsfunktion (Definition des Flammenkontaktpunkts)	—
h	Spezifische Enthalpie der Mischung	J/kg
h_s	Spezifische sensible Enthalpie der Mischung	J/kg
h_k	Spezifische Enthalpie der Spezies k	J/kg
$h_{k,s}$	Spezifische sensible Enthalpie der Spezies k	J/kg
k	Geschwindigkeitskoeffizient	\mathcal{U}
k_B	Boltzmannkonstante ($1.38064852 \cdot 10^{-23}$)	$\text{m}^2 \text{kg}/\text{s}^2 \text{K}$
k_c	Konzentrationsabhängige Gleichgewichtskonstante	\mathcal{U}
k_k^T	Mischungsgemittelter Thermodiffusionsfaktor der Spezies k	—
m_k	Masse der Spezies k	kg
p	Druck	$\text{kg}/\text{s}^2 \text{m}$
q_i	Enthalpiefluss in Richtung i	$\text{J}/\text{m}^2 \text{s}$
r	Allgemeiner Radius	m
$r_{\text{fr}}, r_{\text{br}}$	Reaktionsrate der Hin- und Rückreaktion	$\text{mol}/\text{m}^3 \text{s}$
s_1	Laminare Flammengeschwindigkeit	m/s
s_k	Spezifische Entropie der Spezies k	$\text{J}/\text{kg K}$
t	Zeit	s

t_F	Charakteristische Flammenzeit	s
u_i	Geschwindigkeit in Richtung i	m/s
x_i or x, y, z	Kartesische Koordinaten	m
x_{OH}	Flammenkontaktpunkt auf Basis des OH-Kriteriums	m
x_{CO_2}	Flammenkontaktpunkt auf Basis des CO ₂ -Kriteriums	m

Griechische Großbuchstaben	Unit
----------------------------	------

$\Delta h_{f,k}$	Bildungsenthalpie der Spezies k	J/kg
Δ_t	Zeitschrittweite	s
Δ_x	Gitterweite	m
$\Delta_R G^0$	Gibbs'sche Reaktionsenthalpie	J/kg
$\Delta_R H$	Reaktionsenthalpie	J/kg
$\Delta_R S$	Reaktionsentropie	J/K kg
Γ	Allgemeiner Diffusionskoeffizient	\mathcal{U}
$\Omega_{kj}^{(1,1)}$	Reduziertes Stoßintegral der Spezies k und j	—
Φ	Allgemeiner Skalar	\mathcal{U}

Griechische Kleinbuchstaben	Unit
-----------------------------	------

α_{kj}^T	Binärer Thermodiffusionsfaktor der Spezies k und j	—
δ^F	Flammendicke	m
δ_{ij}	Kronecker-Symbol	—
ϵ	Allgemeiner Fehler	\mathcal{U}
$\epsilon_{\dot{m}}$	Massendefizit im Kontext des Druckkorrekturverfahrens	kg/s
λ	Wärmeleitfähigkeit	W/m K
λ_T	Temperaturleitfähigkeit	m ² /s
μ	Dynamische Viskosität	kg/s m
μ_k	Dynamische Viskosität der Spezies k	kg/s m
ν	Kinematische Viskosität	m ² /s
ν'_k	Stöchiometrischer Koeffizient der Spezies k auf der Seite der Reaktanten	—
ν''_k	Stöchiometrischer Koeffizient der Spezies k auf der Produktseite	—
ξ_i	Lokale zellorientierte Koordinate	—
ρ	Dichte der Mischung	kg/m ³
σ_{kj}	Mittlerer Moleküldurchmesser der Komponenten k und j	m
τ	Dimensionslose Zeit	—

τ_{ij}	Komponenten des viskosen Spannungstensors	$\text{kg/s}^2 \text{ m}$
φ	Beliebiger Skalar	\mathcal{U}
ϕ	Äquivalenzverhältnis	—
χ	Skalare Dissipationsrate	\mathcal{U}
$\dot{\omega}_k$	Chemischer Quellterm der Spezies k	$\text{kg/m}^3 \text{ s}$

Indizes

\cdot_b	Zustand im heißen Abgas
\cdot_{br}	Rückreaktion
\cdot_D	Einen Knotenpunkt stromab
\cdot_{eq}	Gleichgewichtszustand
\cdot_F	Brennstoff
\cdot_{fr}	Hinreaktion
\cdot_l	Magere Zündgrenze
\cdot_{max}	Maximum
\cdot_{min}	Minimum
$\cdot_{N,E,S,W,T,B}$	Einen Knotenpunkt in Richtung Norden, Osten, Süden, Westen bzw. nach oben und unten
$\cdot_{n,e,s,w,t,b}$	Nord-, Ost-, Süd-, West-, Ober-, Unterseite eines Kontrollvolumens
\cdot_O	Oxidator
\cdot_{pv}	Fortschrittsvariable
\cdot_r	Fette Zündgrenze
\cdot_{ref}	Referenzbedingungen ($T = 298.15 \text{ K}$, $p = 101\,325 \text{ Pa}$)
\cdot_{st}	Stöchiometrische Bedingungen
\cdot_u	Zustand im unverbrannten Frischgas
\cdot_U / \cdot_{UU}	Einen Knotenpunkt bzw. zwei Knotenpunkte stromauf

Dimensionallose Kennzahlen

Le	Lewis-Zahl
Ma	Mach-Zahl
Re	Reynolds-Zahl
Sc	Schmidt-Zahl

Abkürzungen

ATF	Artificially thickened flame
CDS	Central difference scheme
CFD	Computational fluid dynamics

CPU	Central processing unit
DC	Detaillierte Chemie
DNS	Direct numerical simulation
DZ	Diffusionszone
FGM	Flamelet generated manifolds
HOQ	Head-on quenching
HOQEGR	Head-on quenching exhaust gas recirculation
HOQT	Head-on-quenching-Tabelle
ILDm	Intrinsic low-dimensional manifold
LES	Large eddy simulation
LIF	Laser-induced fluorescence
MixAvg	Mixture averaged diffusion
OZ	Oxidationszone
PIV	Particle image velocimetry
RANS	Reynolds-Averaged Navier-Stokes
REDIM	Reaction-diffusion manifold
RK	Runge-Kutta
RZ	Reaktionszone
SMO	Smooke-Mechanismus
GRI	GRI3.0-Mechanismus
SWQ	Sidewall quenching
SWQT	Sidewall-quenching-Tabelle
TVD	Total variation diminishing

Kapitel 1

Einleitung

Diese Arbeit beschäftigt sich mit der Analyse von vorgemischter Verbrennung in der Nähe fester Wände, wie sie in zahlreichen technischen Anwendungen auftritt. Im Folgenden wird zunächst eine Motivation für die hier vorgestellten Untersuchungen und Entwicklungen dargestellt. Hiernach werden der Stand der Wissenschaft in diesem Forschungsfeld zusammengefasst und die Ziele dieser Arbeit formuliert. Im letzten Abschnitt dieses Kapitels wird die Struktur dieser Arbeit erläutert.

1.1 Hintergrund

Der Wohlstand unserer heutigen Gesellschaft lässt sich zu einem großen Teil auf die technische Errungenschaft zurückführen, fossile Energie zunächst in thermische und schließlich in mechanische und elektrische Energie umwandeln zu können. Im Jahr 2017 wurden etwa 85 % [8, 44] des weltweiten Primärenergiebedarfs aus fossilen Energiequellen gedeckt. Vor diesem Hintergrund nimmt die technische Verbrennung eine zentrale Rolle bei der Versorgung mit Wärme und Elektrizität sowie der Bereitstellung von Mobilität ein. Die wesentlichen Energieträger, die hierfür genutzt werden, sind Erdöl, Erdgas und Kohle [8, 110]. Neben den individuellen Vor- und Nachteilen der genannten Brennstoffe ergeben sich zwei wesentliche Nachteile, die für alle fossilen Brennstoffe gleich sind. Diese sind zum einen die Emission von Schadstoffen, wie unverbrannte Kohlenwasserstoffe (unburned hydrocarbons: UHCs), Kohlenmonoxid (CO) und Stickoxide (NO_x), und zum anderen die Freisetzung des klimaschädlichen Treibhausgases Kohlendioxid (CO₂) [43, 45]. Trotz großer Anstrengungen zur Einsparung von Energie und Nutzung alternativer Energiequellen lässt sich anhand der Entwicklungen der jüngsten Dekaden [44, 110] und Prognosen für die kommenden Jahre [45, 110] ableiten, dass auch zukünftige Generation auf die Verbrennung von fossilen Brennstoffen angewiesen sein werden, um ihren Energiebedarf zu decken. In Anbetracht der limitierten Vorkommen fossiler Brennstoffe und um die negativen Auswirkungen, die sich aus der Verbrennung ergeben, zu minimieren, ist es daher eine wichtige Aufgabe, Verbrennungsprozesse so effizient wie möglich zu gestalten. Gleichzeitig werden zunehmend striktere Schadstoffgrenzwerte notwendig, um gesundheitsschädliche und umweltschädliche Emissionen zu reduzieren.

1.2 Motivation der Arbeit

Zur Steigerung der Effizienz von Verbrennungsmotoren, Gasturbinen und Flugtriebwerken sowie zur Senkung von Schadstoffemissionen ist ein detailliertes Verständnis der beteiligten Prozesse und Phänomene erforderlich.

Ein wichtiges Forschungsfeld stellt hierbei die Flamme-Wand-Interaktion (FWI) dar. In vielen technischen Anwendungen tritt eine Flamme in direkten Kontakt mit kalten Wänden. Hierbei kommt es zu Wärmeverlusten, welche einen direkten Einfluss auf die Effizienz des Prozesses haben. Durch den Entzug der Wärme aus der Reaktionszone der Flamme kommt es weiterhin zu einer veränderten Reaktionskinetik, welche die Bildung von Schadstoffen wie unverbrannte Kohlenwasserstoffe zur Folge hat [85]. Auf der anderen Seite kommt es zur thermischen Belastung von Bauteilen, deren Vorhersage ein maßgebliches Auslegungskriterium darstellt. Durch den Trend des Downsizings [20], welcher zu einem größeren Oberflächen-zu-Volumen-Verhältnis bei Verbrennungsmotoren führt, und durch die Entwicklung von Magerverbrennungskonzepten [56] im Kontext von Flugtriebwerken werden die Phänomene der Flamme-Wand-Interaktion zunehmend wichtiger.

Neben theoretischen Methoden und experimentellen Untersuchungen bietet die numerische Simulation ein leistungsfähiges und kostengünstiges Werkzeug zur Abbildung, Erforschung und Vorhersage von Verbrennungsprozessen. Damit ermöglicht sie häufig die Einsparung teurer Prototypen im Optimierungsprozess realer Verbrennungsmotoren und Brennkammern.

Mit der Detaillierten Chemie (DC) steht ein sehr akkurates Berechnungswerkzeug zur Vorhersage und Erforschung von Verbrennungsprozessen zur Verfügung. Sie ermöglicht eine detaillierte Untersuchung von Einzelprozessen und Mechanismen, wie sie in dieser Arbeit im Kontext der FWI durchgeführt werden. Aufgrund des hohen Rechenaufwands beschränkt sich ihre Anwendung jedoch auf kleine generische Konfigurationen. Zur Abbildung realer Verbrennungsmotoren und Brennkammern ist deshalb eine Vereinfachung der chemischen Abbildung erforderlich. Ein Ansatz stellt hierbei die Tabellierte Chemie dar, welche in dieser Arbeit für wandnahe Verbrennung weiterentwickelt wird.

1.3 Stand der Wissenschaft

1.3.1 Chemiereduktion

Wie bereits in der Motivation der Arbeit erwähnt, können komplexe Geometrien oder reale Verbrennungsmaschinen aufgrund des hohen Rechenaufwands nicht mit Detaillierter Chemie berechnet werden. Stattdessen müssen reduzierte Modelle entwickelt werden, welche eine hohe Vorhersagegenauigkeit mit einem geringen Rechenaufwand verbinden. Die Einsparungen basieren hierbei zum einen auf der Reduktion der Anzahl der zu lösenden Gleichungen und zum anderen auf den geringen Anforderungen hinsichtlich der zeitlichen und räumlichen Auflösung. Ein üblicher Ansatz ist die Verwendung von reduzierten Chemiemechanismen. Sie werden als Submenge eines vollen Mechanismus abgeleitet, wobei die Reaktionen identifiziert werden, welche die wesentlichen Eigenschaften der Flamme bestimmen. Neben solchen mathematischen Reduktionen werden häufig auch Ein-Schritt-Mechanismen (oder solche mit sehr wenigen Schritten) verwendet, um die

Verbrennungschemie abzubilden. Eine weitere Alternative bietet die Chemietabellierung. Chemietabellen enthalten dabei den gesamten thermochemischen Zustand und werden mithilfe von Kontrollvariablen ausgelesen, welche im Rahmen der CFD-Simulation berechnet werden. Die Tabellen entstehen hierbei im Rahmen eines einmaligen vorangehenden Arbeitsschritts, wobei eine Reihe von meist eindimensionalen detaillierten Chemierechnungen durchzuführen sind.

Einer der ersten Tabellierungsansätze basierte auf der Parametrisierung chemischer Zustände auf den Mischungsgrad und erlaubte damit die Vorhersage von nicht vorgemischten Flammen [13, 84, 114, 116]. Um den Einfluss der Dehnungsgeschwindigkeit der berechneten Strömung berücksichtigen zu können, nahm Peters [82, 83] weiterhin die skalare Dissipationsrate des Mischungsgradfeldes als zusätzlichen Parameter in das Tabellierungskonzept auf. In ähnlicher Weise etablierten Gicquel et al. [29] und van Oijen und de Goey [73] die Verwendung einer Fortschrittsvariablen zur Parametrisierung von Vormischflammen. Dieser Ansatz konnte in Kombination mit dem Mischungsgrad als zweite Kontrollvariable zur Vorhersage von inhomogenen Verbrennungsszenarien erweitert werden [72] [51]. Eine universellere Beschreibung der Chemie wurde weiterhin von Nguyen et al. [71] eingeführt, welche auf der Lösung von mehrdimensionalen detaillierten Chemierechnungen beruht. Hierbei besteht die Möglichkeit, drei weitere Parameter in die Tabellierung aufzunehmen, um Diffusionsprozesse quer zu den beiden Kontrollvariablen Mischungsgrad und Fortschrittsvariable berücksichtigen zu können. Weiterhin wurde mit der Einführung der Enthalpie als Kontrollvariable die Vorhersage von Wärmeverlusten, wie sie an nicht adiabaten Wänden entstehen, ermöglicht [51]. Ein ähnlicher Tabellierungsansatz, welcher sich auf die Separation von schnellen und langsamen chemischen Prozessen stützt, wurde in [60] und [14] von Maas und Bykov vorgeschlagen. Weitere Entwicklungen dieses Konzepts lassen sich [70, 106, 109] entnehmen.

1.3.2 Flamme-Wand-Interaktion

Die Thematik der Flamme-Wand-Interaktion (FWI) wurde in der Vergangenheit im Rahmen zahlreicher experimenteller und numerischer Untersuchungen erforscht. Diese konzentrieren sich vorwiegend auf den Verlöschabstand der Flamme, Wärmeflüsse, Bildung von unverbrannten Kohlenwasserstoffen, Bildung von Kohlenmonoxid und Ruß sowie Flammengeometrie, Flammenbewegung und Radikalrekombination. Hierbei wurden meist generische Konfigurationen verwendet, um das komplexe Zusammenspiel der FWI, wie es in realen Maschinen auftritt, in Teilaspekte zerlegen zu können. Diese sind das Head-on-quenching (HOQ)- und das Sidewall-quenching (SWQ)-Szenario, welche im Abschnitt 4.1 näher erläutert werden. Eine sehr ausführliche Übersicht über das FWI-Forschungsfeld wurde von Dreizler und Böhm [20] erarbeitet. Nachfolgend werden wesentliche Erkenntnisse der FWI-Forschung zusammengefasst.

Erste eindimensionale Simulationen des HOQ-Szenarios mithilfe der Detaillierten Chemie wurden von Popp und Baum [87] durchgeführt. Sie untersuchten laminare stöchiometrische Methan-Luft-Flammen bei atmosphärischem Druck und das Verlöschen an einer Wand bei unterschiedlichen Wandtemperaturen. Die Studien zeigten einen zunehmenden Wandwärmefluss für zunehmende Wandtemperaturen. Bei niedrigen Wandtemperaturen ($300\text{ K} < T < 400\text{ K}$) kann die Wand als inert angenommen werden, da die Konzentrationen von Radikalen gering sind. Es wurde eine untergeordnete Rolle der thermischen

Diffusion (Soret-Effekt) bei diesen Temperaturen festgestellt. Bei Wandtemperaturen größer 600 K wurden sowohl katalytische Effekte der Wand als auch die Thermodiffusionseffekte beobachtet. In einer weiteren Studie von Popp et al. [88] wurden Methan-Luft- und Propan-Luft-Flammen untersucht. Hierbei zeigte sich, dass bei erhöhten Wandtemperaturen exotherme Radikalrekombinationsreaktionen zu einer Erhöhung des Wandwärmeflusses führen. Ezekoye et al. [23] untersuchte das HOQ-Szenario experimentell in geschlossenen Kammern unter Verwendung von Methan und Propan für verschiedene Äquivalenzverhältnisse. Im Rahmen dieser Studie wurden zusätzlich numerische Simulationen auf Basis von Ein-Schritt-Mechanismen durchgeführt. Hiermit konnte die Abhängigkeit des Wandwärmeflusses von der Wandtemperatur nicht abgebildet werden. Hieraus ließ sich schlussfolgern, dass das Flammenverlöschn nicht mit vereinfachten Chemiemodellen dieser Art abgebildet werden kann, da Radikalrekombinationen, welche sich durch geringe Aktivierungsenergien auszeichnen, einen signifikanten Einfluss auf den Verlöschprozess haben.

Eine weitere Studie zur FWI wurde von Hasse et al. [37] anhand eines eindimensionalen HOQ-Szenarios durchgeführt, wobei eine laminare Isooktanflamme untersucht wurde. Hierbei wurde der Einfluss des Drucks, der Temperatur und des Mischungsverhältnisses auf die Bildung von unverbrannten Kohlenwasserstoffen untersucht. Weiterhin wurde der Einfluss des Soret-Effekts sowie der Einfluss verschiedener Chemiemechanismen analysiert. Es zeigte sich, dass der Soret-Effekt den Transport von unverbrannten Zwischenspezies in heiße Regionen verlangsamt und somit deren Nachoxidation vermindert.

Alshaalan und Rutland [1, 2] untersuchten das SWQ-Szenario im Rahmen einer dreidimensionalen Direkten Numerischen Simulation (DNS). Hierbei wurde eine V-Flamme in einer voll entwickelten turbulenten Couvette-Strömung analysiert, wobei ein Ein-Schritt-Mechanismus zur Abbildung der Verbrennungschemie verwendet wurde. Es zeigte sich, dass die Flamme die Längenskala der Turbulenz fern der Wand deutlich stärker reduziert (etwa auf das Maß der Flammendicke) als es in Wandnähe der Fall ist. Dies ließ sich auf die schwache chemische Reaktion der Flamme nahe der Wand zurückführen. Ähnliche Studien wurden von Bruneaux et al. [9, 10] durchgeführt.

Gruber et al. [31, 32, 33] untersuchte das SWQ-Szenario in mehreren DNS-Studien, wobei er erstmals eine voll aufgelöste turbulente Strömungssimulation in Kombination mit einem detaillierten Chemiemechanismus für Wasserstoffflammen nutzte. Er analysierte den Einfluss der turbulenten Wandgrenzschicht auf die Flammenstruktur, die Flammengeschwindigkeit und das zeitliche und räumliche Verhalten des Wandwärmeflusses im Kontext einer V-Flammenkonfiguration. Hierbei beobachtete er eine Aufdickung der Flamme in Wandnähe und führte 70 % der Wärmefreisetzung an der Wand auf exotherme Radikalrekombinationen zurück. Zudem analysierte er die relevanten Mechanismen beim Rückschlagen von Flammen innerhalb turbulenter Wandgrenzschichten.

Chauvy et al. [15] beschäftigte sich in seinen Studien mit der Entstehung von unverbrannten Kohlenwasserstoffen an Wänden und in Spalten. Hierbei führte er laminare Simulationen durch, wobei er einen reduzierten Chemiemechanismus zur Abbildung der Isooktanverbrennung nutzte. Ein wesentlicher Aspekt seiner Studien war die Untersuchung des Einfluss der Spaltweite auf das Verbleiben von unverbranntem Brennstoff und Zwischenspezies. Dabei konnte gezeigt werden, dass enge Spalte vermehrt zu unverbranntem Brennstoff und weite Spalte zum Zurückbleiben von Zwischenspezies führen. Eine weitere

laminare Simulation des SWQ-Szenarios wurde von [4, 5] durchgeführt. Dabei zeigte sich, dass magere Gemische zu einem höheren Anteil von unverbranntem Brennstoff führen, während stöchiometrische Flammen einen höheren Anteil von Zwischenspezies bilden. Die in dieser Arbeit dargestellten Konfigurationen orientieren sich an dem von Mann [64] und Mann et al. [65] untersuchten HOQ-Brenner sowie an dem von Jainski et al. [47, 48] und Jainski [46] untersuchten SWQ-Brenner, welche in den Abschnitten 4.3.1 und 4.4.1 beschrieben werden. An beiden Brennern wurden Geschwindigkeitsfelder mittels particle image velocimetry (PIV) aufgenommen. Weiterhin wurden Temperaturen auf Basis der Kohärenten Anti-Stokes-Raman-Streuung (CARS) und Kohlenmonoxidkonzentrationen mithilfe der Laserinduzierten Fluoreszenz (LIF) innerhalb der Flammenverlöschzone gemessen.

Erste numerische Untersuchungen des HOQ-Brenners wurden von Pantangi et al. [78] und Pantangi [77] durchgeführt. Hierbei wurde eine Large-Eddy-Simulation (LES) in Kombination mit dem Flamelet-Generated-Manifold-Modell (FGM) zur Vorhersage der Strömung, der turbulenten Mischungsprozesse und der Wandwärmeflüsse genutzt.

Heinrich et al. [39, 40, 41] und Heinrich [38] untersuchten den SWQ-Brenner ebenfalls im Rahmen einer LES basierend auf dem FGM-Modell. Der Fokus dieser Untersuchungen lag hierbei auf der Vorhersage des thermochemischen Zustands in der Region des Flammenverlöschens.

1.4 Ziele und Rahmen dieser Arbeit

Die Ziele dieser Arbeit lassen sich in zwei Aspekte aufteilen. Der erste Aspekt ist die Untersuchung der Physik, welche sich beim Verlösch von Flammen an kalten Wänden abspielt. Sie hat einen beschreibenden und analysierenden Charakter. Der zweite Aspekt besteht hingegen in der Modellentwicklung, welche die aus der Analyse gewonnenen Erkenntnisse nutzt, um ein zuverlässiges Vorhersagemodell mit einem möglichst hohen Maß an Universalität zu erzielen. Hierbei dient FASTEST, als akademischer CFD-Löser, sowohl zur Simulation und Untersuchung der FWI als auch zur Erzeugung der thermochemischen Datengrundlage, welche in die Modellentwicklung und Chemietabellierung einfließt. Dementsprechend lassen sich nachfolgende Ziele formulieren:

1. Analyse des thermochemischen Zustands in der Region des Flammenverlöschens im Kontext generischer FWI-Konfigurationen sowie Analyse der dominierenden physikalischen Mechanismen. Ziel hierbei ist die Erklärung der in der Literatur beschriebenen, experimentell beobachteten CO-Akkumulation in der Verlöschzone, die bisher unverstanden blieb. Zur Beschreibung der wandnahen Verbrennung wird der Detaillierte-Chemie-Ansatz verwendet, welcher eine zuverlässige Abbildung der Prozesse ermöglicht. Zur Untersuchung der CO-Akkumulation wird weiterhin eine Analysemethode basierend auf einem Lagrange'schen Ansatz entwickelt, implementiert und auf die FWI-Konfiguration angewendet.
2. Bewertung aktueller Chemiereduktionsansätze im Hinblick auf die in Punkt 1 festgestellten physikalischen Prozesse. Dies erfordert zunächst die Einbindung des REDIM-Chemiereduktionsansatzes in den FASTEST-Code, welche dessen bestehende FGM-Funktionalität um eine weitere Methode erweitert. Hierauf aufbauend werden die

Chemiereduktionsansätze mithilfe einer Budget-Analyse auf Basis der transformierten Speziestransportgleichung untersucht.

3. Die aus Punkt 2 gewonnenen Erkenntnisse hinsichtlich der Defizite der bestehenden Chemiereduktionsansätze werden schließlich zur Entwicklung einer neuen Chemietabellierungsmethode genutzt. Ziel ist die Verbesserung der Vorhersagegenauigkeit bei der Beschreibung verschiedener FWI-Szenarien. Hierbei soll der neue Ansatz eine höhere Universalität hinsichtlich seiner Anwendbarkeit gegenüber den bestehenden Ansätzen aufweisen. Die Entwicklung beinhaltet dabei die Konzeptfindung, die Implementierung sowie die Verifikation des neuen Chemiereduktionsansatzes. Schließlich erfolgt seine Anwendung auf die in Punkt 1 untersuchte FWI-Konfiguration.

1.5 Struktur der Arbeit

Die vorliegende Arbeit gliedert sich in sechs Kapitel. Im Anschluss an diese Einleitung werden in Kapitel 2 die theoretischen Grundlagen zur Beschreibung von reagierenden Strömungen sowie deren numerische Behandlung dargestellt. In Kapitel 3 wird die mathematische Beschreibung der Verbrennungschemie sowie ihre Abbildung im Kontext etablierter Modelle vorgestellt. Die Untersuchung wandnaher Verbrennungskonfigurationen wird in Kapitel 4 beschrieben. Hierbei werden die erhaltenen numerischen Ergebnisse verschiedener Verbrennungsansätze anhand experimenteller Ergebnisse [48] bewertet. Weiterhin werden Analysen durchgeführt, um die wesentlichen Wirkmechanismen im Kontext der Flamme-Wand-Interaktion (FWI) zu ergründen. Kapitel 5 stellt schließlich die Entwicklung einer neuen Chemietabelle dar. Hierbei werden zunächst Analysen des etablierten FGM-Verbrennungsansatzes vorgenommen, aus welchen sich Kriterien für die Weiterentwicklung ableiten lassen. Es folgt die Darstellung des Tabellierungskonzepts und seine konkrete Umsetzung. Nach einer Verifikation des entwickelten Modells, folgt seine Anwendung auf den Sidewall-quenching-Brenner, wobei eine Bewertung und eine Analyse der neuen Chemietabelle vorgenommen werden. Die Arbeit schließt mit einer Zusammenfassung und einem Ausblick in Kapitel 6.

Kapitel 2

Mathematische und numerische Beschreibung von reagierenden Strömungen

In diesem Kapitel werden die grundlegenden Gleichungen zur Beschreibung von reagierenden Strömungen beschrieben. Eine Voraussetzung für die in dieser Arbeit verwendete mathematische Beschreibung ist die Annahme räumlich kontinuierlicher Verläufe des physikalischen Zustands. Diese Annahme ist zulässig, da die zu beschreibenden Strömungs- bzw. Verbrennungsphänomene räumliche Strukturen von weit größerer charakteristischer Längenmaße beinhalten als die mittlere freie Weglänge, die unter typischen thermodynamischen Bedingungen bei technischen Verbrennungsanwendungen zu erwarten sind. Somit können die Eigenschaften der Gase, wie beispielsweise ihre Dichte, als mittlere Eigenschaft einer sehr großen Zahl von Molekülen beschrieben werden. Eine quantitative Bewertung der Kontinuumsannahme bietet die Knudsen-Zahl, welche die mittlere freie Weglänge ins Verhältnis mit der charakteristischen Länge des Strömungsfeldes setzt und in dieser Arbeit deutlich kleiner als eins ist. Hierauf basierend lässt sich ein System aus partiellen gekoppelten Differenzialgleichungen für die Erhaltung der Masse, des Impulses, der Enthalpie und der Stoffmassenbrüchen formulieren, welche im Folgenden dargestellt werden. Ein wichtiger weiterer Aspekt in diesem Zusammenhang bildet die mathematische Abbildung der Diffusion, für welche verschiedene Approximationen genutzt werden können und in dieser Arbeit zur Anwendung kommen. Weiterhin folgt die Beschreibung der Zustandsgleichung für reaktive Strömungen, die eine geringe Mach-Zahl aufweisen. Die Beschreibung der Transformation der Speziestransportgleichung als Grundlage der später durchgeführten Analysen erfolgt ebenfalls in diesem Teil der Arbeit. Das Kapitel schließt mit der numerischen Behandlung und dem Lösungsverfahren des Gleichungssystems.

2.1 Theoretische Grundlagen

Zur Beschreibung der Strömung und des thermodynamischen Zustands müssen sowohl Gleichungen für Erhaltungsgrößen als auch eine Zustandsgleichung gelöst werden, welche die thermodynamischen Zustandsgrößen wie Druck, Temperatur und Dichte in Zusammenhang bringt. Sämtliche Erhaltungsgleichungen werden in Indexnotation und entsprechend der Einstein'schen Summenkonvention für ein kartesisches Koordinatensystem notiert, wie sie in [104] verwendet wird.

2.1.1 Die Erhaltungsgleichung der Masse

Für die in dieser Arbeit betrachteten physikalischen Prozesse bleibt die Masse erhalten. Dies gilt auch insbesondere innerhalb chemischer Reaktionen, bei welchen die massebehafteten Atome zwar in andere Verbindungen gebracht werden, nicht jedoch an Masse verlieren oder hinzugewinnen. Dies führt dazu, dass die zeitliche Änderung der Masse in einem gegebenen Volumen der Summe der Massenflüsse über die gesamte Oberfläche dieses Volumens entspricht. Daraus lässt sich nachfolgende Gleichung ableiten:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j) = 0. \quad (2.1)$$

Hierin bezeichnet ρ die Dichte, und u_j entspricht den drei Geschwindigkeitskomponenten für ein dreidimensionales kartesisches Koordinatensystem.

2.1.2 Die Erhaltungsgleichung des Impulses

Die Impulserhaltung besagt, dass die zeitliche Änderung des Impulses eines Fluidteilchens der Summe der hierauf wirkenden Kräfte entspricht. Dies wird für die Betrachtung von Strömungen zweckmäßigerweise wie folgt formuliert:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \tau_{ij} - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho g_i \quad i \in \{1, 2, 3\}. \quad (2.2)$$

Hierin sind τ_{ij} der Spannungstensor, p der Druck und ρg_i der Vektor der Gravitationskraft. Für die Schließung des Spannungstensors wird die Annahme eines Newton'schen Fluids gemacht, dessen Materialgesetz den Spannungstensor in Zusammenhang mit der dynamischen Viskosität μ und den lokalen Geschwindigkeitsgradienten setzt:

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij}. \quad (2.3)$$

2.1.3 Die Erhaltungsgleichung des Stoffmassenbruchs

Zur Berechnung der Gaszusammensetzung können Erhaltungsgleichungen für die einzelnen Komponenten des Gases gelöst werden. Dies ist beispielsweise im Kontext der in Kapitel 3 beschriebenen Detaillierten Chemie erforderlich. Die Stoffmassenbrüche Y_k werden typischerweise, basierend auf den Massen m_α der insgesamt N_s Komponenten, als

$$Y_k = \lim_{V \rightarrow 0} \frac{m_k}{\sum_{\alpha=1}^{N_s} m_\alpha} \quad (2.4)$$

definiert. Zur Einsparung von Rechenkosten werden häufig nur die Erhaltungsgleichungen einer geringen Anzahl von Variablen, die sich zur Beschreibung der Gaszusammensetzung oder ihres thermodynamischen Zustands eignen, gelöst. Sie werden häufig als Linearkombination von Stoffmassenbrüchen definiert und als Kontrollvariablen bezeichnet. Sowohl für Stoffmassenbrüche als auch für Kontrollvariablen lässt sich die Transportgleichung als

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j Y_k) = - \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho V_{k,j} Y_k) + \dot{\omega}_k \quad (2.5)$$

notieren. Approximationen des diffusiven Terms (erster Term auf der rechten Seite) werden in Abschnitt 2.1.6 dieses Kapitels erläutert. Der chemische Quellterm $\dot{\omega}_k$ wird in Kapitel 3 näher betrachtet.

2.1.4 Die Erhaltungsgleichung der Enthalpie

Die Erhaltung der Energie stellt die letzte fundamentale Bilanzgleichung der mathematischen Beschreibung reaktiver Strömungen dar. Zur Bilanzierung der Energie wird in dieser Arbeit die Enthalpie h verwendet, welche sich für offene Systeme, also solche bei denen Stoff- und Wärme fließen über die Systemgrenzen stattfinden, besser eignet als beispielsweise die innere Energie [107]. Sie ermöglicht die Abbildung von Wärme flüssen über kalte Wände oder auch die Abbildung von Mischungsprozessen verschiedener Gasströme, deren spezifische Enthalpie sich unterscheidet. Als Bilanzgrößen werden in dieser Arbeit sowohl die Enthalpie h im Kontext der Tabellierten Chemie als auch die sensible Enthalpie h_s im Kontext der Detaillierten Chemie verwendet. Während die sensible Enthalpie lediglich der spürbaren Wärme Rechnung trägt, kommt für die Enthalpie h ein chemisch gebundener Enthalpieanteil hinzu. Zwischen ihnen ergibt sich nachfolgender Zusammenhang:

$$h = \int_{T_{\text{ref}}}^T c_p dT + \Delta h_f^{\text{ref}} = h_s + \Delta h_f^{\text{ref}}. \quad (2.6)$$

Hierin entsprechen c_p der mittleren Wärmekapazität bei konstantem Druck und Δh_f^{ref} der mittleren Bildungsenthalpie bei der Referenztemperatur T^{ref} . Diese mittleren Größen stehen über

$$h = \sum_{k=1}^{N_s} Y_k h_k, \quad c_p = \sum_{k=1}^{N_s} Y_k c_{p,k}, \quad \Delta h_f^{\text{ref}} = \sum_{k=1}^{N_s} Y_k \Delta h_{f,k}^{\text{ref}} \quad (2.7)$$

mit den entsprechenden Größen der reinen Gase in Zusammenhang. Wesentliches Merkmal von Verbrennung, wie sie in dieser Arbeit behandelt wird, ist die Wandlung eines Teils der chemisch gebundenen Enthalpie Δh_f^{ref} in sensible Enthalpie h_s . Als Ausgangspunkt für die Erhaltungsgleichung eignet sich die Formulierung zunächst für die Enthalpie h :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j h) = \frac{Dp}{Dt} + \tau_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + \dot{Q} + \rho \sum_{k=1}^{N_s} Y_k f_{k,j} V_{k,j} - \frac{\partial q_j}{\partial x_j}. \quad (2.8)$$

Bei niedrigen Mach-Zahlen können die Enthalpieänderung aufgrund von Druckvariation sowie die Erwärmung des Fluids aufgrund von Dissipation der kinetischen Energie durch Reibung vernachlässigt werden [86]:

$$\frac{Dp}{Dt} \approx 0, \quad \tau_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \approx 0. \quad (2.9)$$

Der dritte Term der rechten Seite in Gleichung 2.8 ermöglicht die Berücksichtigung von externen Enthalpiequellen bzw. -senken. Dies können zum Beispiel Zündfunken, wie in einem Ottomotor, oder Wärmestrahlung, wie sie in Kohlebrennkammern auftritt, sein. Da jedoch in den hier behandelten generischen Methanflammenkonfigurationen keine Wärmequellen dieser Art auftreten bzw. Strahlung eine untergeordnete Rolle spielt, wird

$$\dot{Q} \approx 0 \quad (2.10)$$

angenommen. Der vierte Term berücksichtigt alle Volumenkräfte, die auf das Fluid wirken. Hierbei wird zunächst nur die Gravitation in Betracht gezogen. Da diese auf alle Anteile des Fluids in gleichem Maße wirkt, kann die Beschleunigungskonstante zunächst aus der Summe gezogen werden. Die verbleibende Summe jedoch liefert keinen Beitrag mehr zur Enthalpiebilanz, da sich die Diffusionsströme der Fluidkomponenten aufheben:

$$\rho \sum_{k=1}^{N_s} Y_k f_{k,j} V_{k,j} = \rho g_j \sum_{k=1}^{N_s} Y_k V_{k,j} = 0. \quad (2.11)$$

Der letzte Term der rechten Seite berücksichtigt Enthalpieflüsse aufgrund von Wärmeleitung sowie aufgrund der Diffusion der Spezies:

$$q_j = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^{N_s} h_k Y_k V_{k,j}. \quad (2.12)$$

Die weitere Spezifizierung dieses Ausdrucks erfolgt in Abschnitt 2.1.7. Nach Einsetzen der oben genannten Terme nimmt die Enthalpieerhaltungsgleichung folgende Form an:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j h) = -\frac{\partial q_i}{\partial x_j}. \quad (2.13)$$

Mithilfe der Definition der sensiblen Enthalpie h_s kann ihre Erhaltungsgleichung in der Form

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h_s) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j h_s) = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \rho \sum_{k=1}^{N_s} h_{s,k} Y_k V_{k,j} - \sum_{k=1}^{N_s} \dot{\omega}_k \Delta h_{f,k}^{\text{ref}} \quad (2.14)$$

notiert werden.

2.1.5 Die thermische Zustandsgleichung für Strömungen bei geringer Mach-Zahl

Zur Lösung der bisher eingeführten Transportgleichungen ist eine Gleichung zur Beschreibung des thermodynamischen Zustands des Fluids erforderlich. Im Rahmen dieser Arbeit wird hierfür von einem idealen Gas ausgegangen, dessen Zustandsgleichung Druck, Temperatur und Dichte in Zusammenhang bringt:

$$\rho = \frac{p}{T} \frac{\mathcal{M}}{\mathcal{R}}. \quad (2.15)$$

Dabei bezeichnen \mathcal{R} die universelle Gaskonstante und \mathcal{M} die mittlere molare Masse der Gasmischung, welche sich aus den molaren Massen der einzelnen Komponenten \mathcal{M}_k berechnen lässt:

$$\frac{1}{\mathcal{M}} = \sum_{k=1}^{N_s} \frac{Y_k}{\mathcal{M}_k}. \quad (2.16)$$

Nach Gleichung 2.15 kann eine Änderung der Dichte sowohl durch eine Änderung der Temperatur als auch durch eine Änderung des Drucks bedingt sein. Letztere Abhängigkeit wird mit der Schallgeschwindigkeit c quantifiziert:

$$c^2 = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_{\text{isentrop}} = \gamma \frac{\mathcal{R}}{\mathcal{M}} T. \quad (2.17)$$

Kommt es also in einer Strömung zu einer signifikanten Druckvariation, dann führt dies selbst bei geringen Temperaturänderungen zu einer deutlichen Variation der Dichte. Ein Maß für die zu erwartende Druckvariation stellt die Mach-Zahl dar, welche die Fluidgeschwindigkeit mit der Ausbreitungsgeschwindigkeit von Schallwellen (Dichtewellen) ins Verhältnis setzt:

$$Ma = \frac{u}{c}. \quad (2.18)$$

Überschreitet die Mach-Zahl einen Wert von 0,3, so führt die Annahme eines konstanten Drucks zu einem relativen Fehler der Dichte von mehr als 4,5 % [3]. Im Gegensatz dazu liegt die bei der Verbrennung auftretende thermische Expansion, also der temperaturabhängige Teil der Dichteänderung, bei einem Faktor von 10. Da in dieser Arbeit alle auftretenden Strömungsgeschwindigkeiten weit unter der Schallgeschwindigkeit liegen, können Druckvariationen vernachlässigt und in der idealen Gasgleichung ein konstanter Referenzdruck verwendet werden. Diese Vereinfachung führt zu einer Entkopplung von Druck und Dichte, welche die Berücksichtigung akustischer Effekte ausschließen [62]. Damit, und dies ist eine wesentliche Motivation dieser Vereinfachung, reduzieren sich die Anforderung an die zeitliche Auflösung des Lösungsverfahrens und somit die Rechenkosten entsprechender Simulationen.

2.1.6 Diffusionsbehandlung

Zur Behandlung der Diffusion, welche in der Erhaltungsgleichung des Stoffmassenbruchs auftritt, muss ein Ausdruck für die Diffusionsgeschwindigkeiten $Y_k V_{k,j}$ gefunden werden. Eine Näherung, welche sowohl die Stoffdiffusion aufgrund von Konzentrationsgradienten als auch aufgrund von Temperaturgradienten berücksichtigt, ist mit

$$\rho V_{k,j} Y_k = -\rho Y_k \frac{\mathcal{D}_k}{\partial X_k} \frac{\partial X_k}{\partial x_j} - \frac{\mathcal{D}_k^T}{T} \frac{\partial T}{\partial x_j} \quad (2.19)$$

gegeben [111]. Unter Verwendung von $X_k = (\mathcal{M}/\mathcal{M}_k) Y_k$ ergibt sich weiterhin

$$\rho V_{k,j} Y_k = -\rho \frac{\mathcal{D}_k}{\mathcal{M}} \frac{\partial \mathcal{M} Y_k}{\partial x_j} - \frac{\mathcal{D}_k^T}{T} \frac{\partial T}{\partial x_j}. \quad (2.20)$$

Der erste Term stellt jeweils die Diffusion durch Konzentrationsgradienten dar, welche durch das Fick'sche Gesetz [26] beschrieben ist. Der darin enthaltene Diffusionskoeffizient \mathcal{D}_k führt immer zu einer Abschwächung von Konzentrationsgradienten und damit zu einer Vermischung, welche sich durch ein grundsätzlich positives Vorzeichen des Koeffizienten äußert. Der zweite Term bildet den Soret-Effekt ab, dem ein Temperaturgradient zugrunde liegt. Das Vorzeichen seines Diffusionskoeffizienten \mathcal{D}_k^T ist von der betrachteten Spezies abhängig. Bei Vorliegen eines Temperaturgradienten werden relativ schwere Moleküle in Richtung der kalten Region transportiert ($\mathcal{D}_k^T > 0$), während relativ leichte Moleküle in Richtung der heißen Region wandern ($\mathcal{D}_k^T < 0$). Dies führt zu einer entmischenden Wirkung des Soret-Effekts. Im Kontext der Verbrennung von Kohlenwasserstoffen zeigt sich die Wirkung des Soret-Effekt im Wesentlichen anhand der Spezieskonzentrationen von H, H₂ und dem polaren Wassermolekül [80]. Im Kontext der Flame-Wand-Interaktion berichteten Popp und Baum [87], dass der Soret-Effekt für Wandtemperaturen unter 400 K in

Bezug auf den Verlöschabstand und den Wandwärmefluss eine untergeordnete Rolle spielt. Im Rahmen dieser Arbeit wurde jedoch die Beschreibung und Analyse von Kohlenmonoxid fokussiert, dessen zeitliche Entwicklung innerhalb eines transienten FWI-Szenarios unter dem Einfluss des Soret-Effekts bisher nicht dargelegt wurde. Da deshalb eine diesbezügliche Untersuchung vorgenommen werden soll, werden nachfolgend die Grundlagen der Abbildung des Soret-Effekts, basierend auf Gleichung 2.20, vorgestellt.

Da Gleichung 2.20 hinsichtlich der Masse nicht konservativ ist, wird der sich ergebende Fehler über die Bedingung $\sum_{k=1}^{N_s} Y_k = 1$ einer Spezies zugerechnet, deren Konzentration groß gegenüber dem Fehler ist. Somit bleiben seine Auswirkungen vernachlässigbar [68]. Der über die Mischung gemittelte Diffusionskoeffizient \mathcal{D}_k der Spezies k kann über die semiempirische Definition von Stefan [105, 111] mit

$$D_k = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k} \frac{X_j}{D_{kj}}} \quad (2.21)$$

angenähert werden. Die darin verwendeten Diffusionskoeffizienten für binäre Gemische sind mit

$$\mathcal{D}_{kj} = \frac{3k_B^{2/3}}{8\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{T^3(\mathcal{M}_k + \mathcal{M}_j)/(2\mathcal{M}_k\mathcal{M}_j)}}{p\sigma_{kj}^2\Omega_{kj}^{(1,1)}(T^*)}$$

zu berechnen [42], wobei σ_{kj} den mittleren Moleküldurchmesser und $\Omega_{kj}^{(1,1)}(T^*)$ das Kollisionsintegral in Abhängigkeit der reduzierten Temperatur darstellt. Weiterhin entspricht k_B der Boltzmann-Konstanten. Der Koeffizient der Thermodiffusion \mathcal{D}_k^T wird über den Thermodiffusionsfaktor k_k^T mit dem Diffusionskoeffizienten \mathcal{D}_k verknüpft [80]:

$$\mathcal{D}_k^T = \frac{k_k^T}{\rho} \left(\frac{p}{RT} \right)^2 \mathcal{M}_k \mathcal{D}_k. \quad (2.22)$$

Der über die Mischung gemittelte Thermodiffusionsfaktor seinerseits kann mit

$$k_k^T = X_k \cdot \sum_{j=1}^{N_s} X_j \alpha_{kj}^T \quad (2.23)$$

aus den binären Thermodiffusionsfaktoren

$$\alpha_{kj}^T \cong \frac{\xi_{jk}[1 - F(\xi_{kj})](6C_{kj}^* - 5)}{(1 - 12/5B_{kj}^*)c_k + (4\xi_{kj}/3)(\mathcal{M}_j n \mathcal{D}_{kj} / \mu_j) c_j]} \quad (2.24)$$

mit

$$c_k = \frac{X_k}{X_k + X_j} \quad \text{und} \quad \xi_{kj} = \left(\frac{\mathcal{M}_k}{\mathcal{M}_k + \mathcal{M}_j} \right)^{1/2} \quad (2.25)$$

berechnet werden. Hierbei ist μ_k die dynamische Viskosität eines Gases der reinen Spezies k . Sie kann nach Hirschfelder et al. [42] mit

$$\mu_k = \frac{5\sqrt{k_B}}{16\sqrt{\pi}} \left(\frac{\sqrt{\mathcal{M}_k T}}{\sigma^2 \Omega^{(2,2)}(T^*)} \right) \quad (2.26)$$

berechnet werden. Die Funktion $F(\xi)$ ist eine empirische Korrektur der Approximation 2.24 und ist mit

$$F(\xi) = 7,99027(1 - \xi)^2 + 76,0603(1 - \xi)^4 \quad (2.27)$$

gegeben. Für alle Gleichungen sind die Indizes so zu sortieren, dass $\mathcal{M}_j \leq \mathcal{M}_k$ gilt und damit die Konsistenz hinsichtlich des Vorzeichens von \mathcal{D}_k^T sichergestellt wird.

Zahlreiche Simulationen dieser Arbeit wurden unter vereinfachenden Annahmen hinsichtlich der Diffusionsbehandlung durchgeführt. Eine erste Vereinfachung von Gleichung 2.20 ergibt sich unter Vernachlässigung des Soret-Effekts, dessen Relevanz im Abschnitt 4.3 untersucht wird. Die sich ergebende Approximation der Diffusionsgeschwindigkeiten entsprechend Gleichung 2.28 wird im Folgenden als Mischungsgemittelttes Diffusionsmodell oder Mixture-averaged-diffusion (MixAvg)-Modell bezeichnet:

$$V_{k,j}Y_k = -\frac{\mathcal{D}_k}{\mathcal{M}} \frac{\partial \mathcal{M}Y_k}{\partial x_j}. \quad (2.28)$$

Wird eine konstante mittlere molare Masse angenommen, wie es für vorgemischte Methan-Luft-Flammen in guter Näherung gegeben ist [102, 103], vereinfacht sich 2.28 weiter zu

$$V_{k,j}Y_k = -\mathcal{D}_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j}. \quad (2.29)$$

Eine weitere Vereinfachung ergibt sich unter der Annahme, dass alle Spezies sowie die Enthalpie mit gleicher Geschwindigkeit diffundieren. Hierfür wird das Verhältnis der Wärmeleitung zur Stoffdiffusion gebildet, welches mit Lewis-Zahl bezeichnet wird, und für alle Spezies zu eins angenommen:

$$Le_k = \frac{\lambda/c_p}{\rho \mathcal{D}_k} = \frac{\lambda/c_p}{\rho \mathcal{D}} = Le = 1. \quad (2.30)$$

Dies führt auf

$$V_{k,j}Y_k = -\mathcal{D} \frac{\partial Y_k}{\partial x_j}, \quad (2.31)$$

wobei für \mathcal{D} das empirische Modell [102]

$$\frac{\lambda}{c_p} = 2,58 \cdot 10^{-5} \left(\frac{T}{298 \text{ K}} \right)^{0,69} \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1} \quad (2.32)$$

unter Ausnutzung von 2.30 verwendet wird. Die Diffusionsbehandlung unter der Lewis = 1 (Lewis1)-Annahme ist wesentliches Merkmal der Chemietabellierung, wie sie in den nachfolgenden Kapiteln beschrieben wird. Die in Gleichung 2.32 auftretende Wärmekapazität c_p wird mithilfe von NASA-Polynomen [11, 12, 67] berechnet.

2.1.7 Wärmeleitfähigkeit

Wärmeleitung bezeichnet die Diffusion der Enthalpie, deren treibende Kraft im Wesentlichen durch einen Temperaturgradienten gegeben ist. Analog zum Stofftransport kann jedoch auch ein Konzentrationsgradient einen Beitrag zum diffusiven Wärmetransport haben, welcher in der Literatur als Dufour-Effekt bekannt ist. Nach Warnatz et al. [111]

jedoch ist dieser im Kontext von Verbrennung vernachlässigbar. Die Behandlung der Wärmeflüsse in den Gleichungen 2.34 und 2.14 kann analog vorgenommen werden und wird hier lediglich für die Enthalpie h dargestellt. Gleichung 2.12 kann mit Gleichung 2.29 und der Definition entsprechend Gleichung 2.7 als

$$q_j = -\frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial h}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^{N_s} \left(h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \left(\frac{\lambda}{c_p} - \rho \mathcal{D}_k \right) \right) \quad (2.33)$$

notiert werden. Werden wiederum gleiche Diffusivitäten für alle Spezies und die Enthalpie angenommen (vgl. Gleichung 2.30), fällt der zweite Term der rechten Seite weg und es verbleibt der Ausdruck

$$q_j = -\frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial h}{\partial x_j} \quad (2.34)$$

für den Enthalpietransport bzw.

$$q_j = -\frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial h_s}{\partial x_j} \quad (2.35)$$

für den Transport der sensiblen Enthalpie.

2.1.8 Die Speziestransportgleichung im Zustandsraum

Alle bisher besprochenen Erhaltungsgleichungen wurden für den physikalischen Raum formuliert. Sie bilden zusammen ein geschlossenes Differenzialgleichungssystem, welches mit geeigneten Diskretisierungsmethoden, welche in Abschnitt 2.2 dargestellt werden, numerisch gelöst werden kann. Die noch zu erläuternden Quellterme der Speziestransportgleichung sind dabei als bekannte nichtlineare Funktionen der Komposition und der Temperatur darstellbar. Wird bei der Lösung des Gleichungssystems auf ein reduziertes Verbrennungsmodell verzichtet, müssen jedoch zahlreiche Spezieserhaltungsgleichungen gelöst werden. Dies führt zusammen mit der komplexen Berechnung der zugehörigen Quellterme zu einem erheblichen Rechenaufwand. Eine Methode der Chemiereduktion stellt die sogenannte Tabellierte Chemie dar. In Kapitel 3 werden diese und andere Methoden detailliert beleuchtet. An dieser Stelle soll jedoch bereits auf das grundlegende Prinzip eingegangen werden. Im Allgemeinen lässt sich der chemische Zustand durch seine Komposition Y_k , seine Enthalpie h und seinen Druck p beschreiben. Da alle Simulationen in dieser Arbeit bei atmosphärischem Druck durchgeführt werden, wird nachfolgend von diesem abgesehen. Im Rahmen der Chemiereduktion wird der hochdimensionale Parameterraum Y_k auf wenige Kontrollvariablen \mathcal{Y}_i projiziert. Wird anstelle des hochdimensionalen Systems nur das reduzierte System gelöst, so führt dieses dennoch auf die exakte Lösung des ursprünglichen Systems, wenn einerseits eine eindeutige Projizierbarkeit vorlag und andererseits gleiche räumliche Randbedingungen verwendet werden. Ändern sich stattdessen die räumlichen Randbedingungen, kommt es zu einer Verschiebung der Zuordnung $\mathcal{Y}_i \rightarrow Y_k$ und damit zu einer Abweichung der Lösung des reduzierten Systems, selbst wenn die Projektion eindeutig bleibt. Um den Einfluss der Randbedingungen auf die Projektion zu verdeutlichen, soll im Folgenden die Projektion der Speziestransportgleichung in einen zweidimensionalen Kontrollvariablenraum, aufgespannt durch die Enthalpie h und eine Fortschrittsvariable \mathcal{Y} , demonstriert werden. Dabei wird eine eindeutige Abbildbarkeit

des chemischen Zustands Y_k durch die beiden Kontrollvariablen angenommen:

$$Y_k = Y_k(\mathcal{Y}, h). \quad (2.36)$$

Hieraus lässt sich unmittelbar ein Zusammenhang für die räumlichen Gradienten und den partiellen Änderungen im Zustandsraum ableiten:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial \mathcal{Y}} \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial h} \frac{\partial h}{\partial x_j}. \quad (2.37)$$

Die Speziestransportgleichung 2.5 lässt sich unter Verwendung der Diffusionsbehandlung nach Gleichung 2.31 in der Form

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j Y_k) = \mathcal{D} \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} + \dot{\omega}_k \quad (2.38)$$

notieren. Wird für die Kontrollvariable eine Linearkombination von Spezies angenommen, so entspricht ihre Transportgleichung der Speziestransportgleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathcal{Y}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \mathcal{Y}) = \mathcal{D} \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x_j} + \dot{\omega}_{\mathcal{Y}}. \quad (2.39)$$

Die Projektion, welche durch Gleichung 2.36 definiert ist, wird im Folgenden unter der zusätzlichen Annahme der Stationarität ausgeführt. Dies ist im Rahmen dieser Arbeit sinnvoll, da die sich ergebende transformierte Transportgleichung lediglich zur Untersuchung sowie Lösung stationärer Flammen verwendet wird. Gleichung 2.38 lässt sich unter Verwendung der Stationaritätsannahme und den Gleichungen 2.1, 2.13, 2.34 und 2.39 wie im Anhang A schrittweise dargestellt zu

$$0 = \underbrace{\chi_{\mathcal{Y}} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial \mathcal{Y}^2}}_{\text{term I}} + \underbrace{2\chi_{h,\mathcal{Y}} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial \mathcal{Y} \partial h}}_{\text{term II}} + \underbrace{\chi_h \frac{\partial^2 Y_k}{\partial h^2}}_{\text{term III}} + \underbrace{\dot{\omega}_k - \frac{\partial Y_k}{\partial \mathcal{Y}} \dot{\omega}_{\mathcal{Y}}}_{\text{term IV}} \quad (2.40)$$

mit

$$\chi_{\mathcal{Y}} = \rho \mathcal{D} \left(\frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x_i} \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x_i} \right), \quad \chi_h = \rho \mathcal{D} \left(\frac{\partial h}{\partial x_i} \frac{\partial h}{\partial x_i} \right), \quad \chi_{h,\mathcal{Y}} = \rho \mathcal{D} \left(\frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x_i} \frac{\partial h}{\partial x_i} \right) \quad (2.41)$$

transformieren. Dabei bezeichnen $\chi_{\mathcal{Y}}$, χ_h und $\chi_{h,\mathcal{Y}}$ die skalaren Dissipationsraten des Kontrollvariablenfeldes, des Enthalpiefeldes bzw. die skalare Kreuzdissipationsrate. Würden diese als bekannt angenommen, zum Beispiel als Funktionen der Fortschrittsvariable und der Enthalpie, so ließe sich Gleichung 2.40 geschlossen lösen. Die zur Berechnung der Quellterme erforderliche Temperatur könnte dabei aus der Komposition und der Enthalpie berechnet werden, wobei für letztere keine Transportgleichung gelöst werden muss, da sie in dieser Formulierung eine Raumkoordinate darstellt. Tatsächlich jedoch sind die skalaren Dissipationsraten unbekannte Funktionen von \mathcal{Y} und h , deren Verlauf stark von den physikalischen Randbedingungen der betrachteten Konfiguration abhängen. Wie in den nachfolgenden Kapiteln gezeigt wird, werden bei der Chemietabellierung immer, entweder explizit oder implizit, Annahmen für die Verläufe der skalaren Dissipationsraten gemacht, welche ein physikalisches Vorwissen über die Flammenstruktur erfordert. In Kapitel 3 wird weiterhin das Potenzial einer Chemietabellierung analysiert, bei welcher die skalaren Dissipationsraten nicht als Funktion der Kontrollvariablen vorgegeben werden müssen, sondern als zusätzliche Zustandsraumkoordinaten eingeführt werden, womit sich die Dimensionalität des Lösungsraums entsprechend erhöht.

2.2 Numerische Behandlung

In diesem Abschnitt werden die numerischen Methoden dargestellt, welche zur Lösung des in Abschnitt 2.1 dargestellten Gleichungssystems genutzt werden. Im Allgemeinen ist eine analytische Lösung des Differenzialgleichungssystems aufgrund der Komplexität der Rand- und Anfangsbedingungen sowie der Gleichungen selbst nicht möglich, weshalb es numerisch, d. h. in diskretisierter Form, gelöst werden muss. In dieser Arbeit wird der akademische CFD-Code FASTEST verwendet, welcher ursprünglich als RANS-Code für Strömungen konstanter Dichte entwickelt wurde [21, 81]. Der Code verwendet die Finite-Volumen-Methode (FVM), wobei Vereinfachungen für Strömungen niedriger Mach-Zahlen entsprechend Abschnitt 2.1.5 vorgenommen werden [62]. Weiterhin wird das SIMPLE¹-Druck-Korrektur-Verfahren verwendet, wie in [79] vorgeschlagen wurde. Die im Code verwendeten Größen werden jeweils für die Zellzentren eines nichtversetzten Gitters gespeichert. Hierbei werden die Interpolationsmethoden verwendet, wie sie von Rhie und Chow [93] vorgeschlagen wurden, um eine Entkopplung des Druck- und Geschwindigkeitsfeldes zu vermeiden. Der Code wurde hiernach für die Berechnung reaktiver Strömungen weiterentwickelt, welche sich durch eine variable Dichte auszeichnen. Erste Verbrennungssimulationen wurden schließlich von Maltsev [63] und Schneider et al. [96] im RANS-Kontext durchgeführt. Wegner [113] implementierte eine Formulierung für eine variable Dichte und zeigte damit die generelle Machbarkeit der flameletbasierten Verbrennungssimulation auf Basis einer LES im Rahmen des FASTEST-Codes. Die Kombination von großen Dichteänderungen, die im Rahmen der Verbrennungsphysik auftreten, zusammen mit der Formulierung für geringe Mach-Zahlen führte jedoch zu Instabilitäten, welche auch in [36, 90, 99] beschrieben wurden. Diese Problematik wurde von Hahn [34] und Olbricht et al. [75] bearbeitet, welche das numerische Verfahren zur Diskretisierung der Skalartransportgleichung im FVM-Kontext modifizierten, sodass auch eine stabile Beschreibung von großen Dichteveränderungen möglich wurde. Die Funktionsfähigkeit wurde in mehreren Arbeiten gezeigt (beispielsweise [35, 75, 76]). Der Code wurde schließlich von Kuenne et al. [54] und Künne [55] für die Verwendung des FGM-Ansatzes weiterentwickelt, welcher die Simulation vorgemischter Verbrennung ermöglicht. Beträchtliche Beiträge im Bereich der FGM-Methodenentwicklung wurden auch von Ketelheun [49] und Ketelheun et al. [50] geleistet. Im Rahmen ihrer Arbeit integrierte sie nichtadiabate Verbrennungsphysik in das FGM-Konzept, wodurch Wärmeverluste berücksichtigt werden konnten. Weiterhin wurde der Code durch Meier [68] um die Funktionalität der Detaillierten Chemie erweitert, wobei dies die Integration eines Löser für steife Gleichungssysteme beinhaltet. Durch seine Beiträge konnten Detaillierte-Chemie-Rechnungen direkt in FASTEST durchgeführt werden, welche sowohl zur Tabellenerzeugung als auch zur Generierung von Referenzlösungen genutzt wird.

In den nachfolgenden Abschnitten werden die räumliche und zeitliche Diskretisierung, welche im FASTEST-Code genutzt werden, dargestellt. Anschließend wird das Druck-Korrektur-Verfahren erläutert. In weiteren Abschnitten werden Randbedingungen besprochen, welche zur Lösung des Differenzialgleichungssystems benötigt werden.

¹Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equation

2.2.1 Räumliche Diskretisierung des Rechengebiets

In FASTEST können komplexe Geometrien mithilfe eines blockstrukturierten Gitters diskretisiert werden, wobei die Zellen eines Blocks beliebigen Hexaedern entsprechen. Mithilfe von O-Grid-Strukturen können weiterhin lokale Verfeinerung erreicht und zylindrische Gebiete vernetzt werden. Für den Informationsaustausch zwischen Blöcken, welcher im Rahmen des Lösen erforderlich ist, werden Ghost-Cell-Layer verwendet, welche eine Überlappung benachbarter Blöcke von einer Zellreihe mit sich bringt. Dabei entspricht der Ghost-Cell-Layer eines Blocks der ersten realen Zellschicht des benachbarten Blocks. An Gebietsrändern werden Ghost-Cell-Layer verwendet, welche eine Dicke von null haben, sodass ihre Zellzentren direkt auf dem Gebietsrand liegen. Für die Gittererzeugung wird die kommerzielle Software ANSYS ICEMCFD [6] verwendet. Die Parallelisierung der Simulationen ist durch die Zerlegung des Rechengebiets realisiert. Die Prozessorkommunikation basiert hierbei auf dem MPI-Framework. Im Kontext der Detaillierten Chemie, bei welcher eine große Anzahl von Transportgleichungen gelöst werden muss, ist zudem das parallele Lösen von Transportgleichungen auf Basis des OpenMP-Frameworks möglich.

2.2.2 Diskretisierung der Transportgleichungen

Der FASTEST-Code verwendet, wie viele andere CFD-Löser, die Finite-Volumen-Methode (FVM), welche ein konservatives Diskretisierungsverfahren darstellt. Die Methode wird am Beispiel eines allgemeinen Skalars vorgestellt, dessen Erhaltungsgleichung mit

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\Phi) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \Phi) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_\Phi \quad (2.42)$$

gegeben ist. Hierbei stellt Γ_Φ einen allgemeinen Diffusionskoeffizient des Skalars Φ dar. Im Rahmen der Finite-Volumen-Methode wird das gesamte Rechengebiet zunächst in Kontrollvolumen (Zellen) aufgeteilt. Gleichung 2.42 lässt sich dann als Bilanzgleichung für jedes Kontrollvolumen in integraler Form entsprechend

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t}(\rho\Phi) dV + \int_V \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \Phi) dV = \int_V \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \right) dV + \int_V \dot{\omega}_\Phi dV \quad (2.43)$$

ausdrücken. Durch Anwendung des Satzes von Gauß

$$\int_V \frac{\partial F_i}{\partial x_i} dV = \int_S F_i n_i dS \quad (2.44)$$

lassen sich der konvektive und der diffusive Term als Oberflächenintegral in der Form

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t}(\rho\Phi) dV + \int_S \rho u_i \Phi n_i dS = \int_S \left(\Gamma_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \right) n_i dS + \int_V \dot{\omega}_\Phi dV \quad (2.45)$$

notieren. Da die Kontrollvolumen die Form von Hexaedern haben und dementsprechend sechs Flächen aufweisen, lässt sich Gleichung 2.45 als

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t}(\rho\Phi) dV + \sum_c \int_{S_c} \rho u_i \Phi n_i dS_c = \sum_c \int_{S_c} \left(\Gamma_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \right) n_i dS_c + \int_V \dot{\omega}_\Phi dV \quad (2.46)$$

formulieren, wobei c dem Index der Seitenfläche entspricht und die Werte n (north), s (south), e (east), w (west), t (top) und b (bottom) annehmen kann. In Abbildung 2.1 ist ein beliebiges Kontrollvolumen mit seinen Nachbarschaftsbeziehungen dargestellt. Wäh-

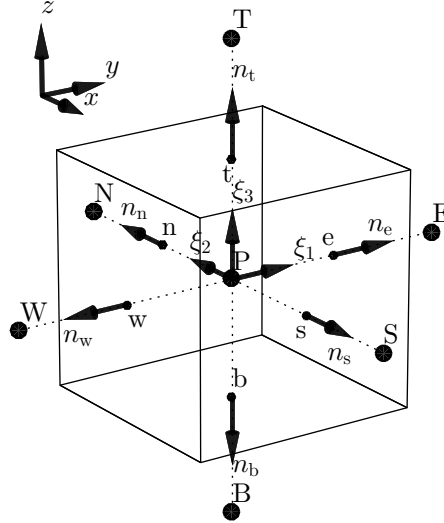


Abbildung 2.1: Beliebiges Kontrollvolumen mit Nachbarschaftsbeziehungen. Großbuchstaben bezeichnen Zellzentren, Kleinbuchstaben bezeichnen Oberflächenzentren. Weiterhin sind die Normalenvektoren auf den Oberflächen mit n_i notiert. Das globale Koordinatensystem (x, y, z) kann beliebig zum lokalen Koordinatensystem (ξ_i) orientiert sein.

rend das Differenzialgleichungssystem entsprechend Abschnitt 2.1 für kartesische Koordinaten formuliert ist, wird zur Approximation der einzelnen Terme in Gleichung 2.46 ein lokales Koordinatensystem (ξ_i) genutzt. Hierfür wird die Koordinatentransformation genutzt, welche in [25] nachgeschlagen werden kann. Bis zu diesem Punkt stellt das Gleichungssystem eine exakte Beschreibung dar, da lediglich mathematische Umformungen genutzt wurden. Unter Verwendung der in Abbildung 2.1 eingeführten diskreten Zell- und Oberflächenzentren sowie der Normalenvektoren lassen sich die Volumen- und Oberflächenintegrale unter Verwendung der Mittelpunktsregel approximieren:

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho \Phi) dV \approx \left. \frac{\partial}{\partial t} (\rho \Phi) \right|_P \delta V, \quad (2.47)$$

$$\int_{S_c} \rho u_i \Phi n_i dS_c \approx \rho u_i \Phi n_i|_c \delta S_c, \quad (2.48)$$

$$\int_{S_c} \left(\Gamma_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \right) n_i dS_c \approx \left(\Gamma_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \right) n_i|_c \delta S_c, \quad (2.49)$$

$$\int_V \dot{\omega}_\Phi dV \approx \dot{\omega}_\Phi|_P \delta V. \quad (2.50)$$

Durch die Approximation wird das Differenzialgleichungssystem in ein algebraisches Gleichungssystem überführt, welches für die Zellzentren gelöst werden soll. Hierfür müssen die Variablenwerte und deren Gradienten auf den Oberflächenzentren, welche in den konvektiven und diffusiven Flüssen auftreten, über Zellzentrenwerte ausgedrückt werden.

2.2.2.1 Konvektive Flüsse

Da für die konvektiven Flüsse Variablenwerte auf den Zelloberflächenzentren nötig sind, müssen diese durch Interpolation basierend auf den Zellzentren berechnet werden. Eine Einführung in diese Interpolationsmethoden ist in [95] gegeben. Das Zentral-Differenzen-Verfahren (CDS: central differencing scheme) in seiner ursprünglichen Variante ist für regelmäßige Gitter von zweiter Ordnung. Um die zweite Ordnung auch für unregelmäßige Gitter zu gewährleisten, werden bei der Interpolation zusätzlich Nachbarpunkte (Zellzentren) genutzt, um die Variablenwerte auf den Zelloberflächen zu erhalten. Die in FASTEST genutzte Interpolationsmethode wurde in [57] vorgeschlagen und basiert auf einer Taylor-Reihenentwicklung. Nachfolgend ist die Interpolationsvorschrift beispielhaft für die East-Fläche formuliert. Sie ist jedoch analog auf alle Flächen anwendbar

$$\Phi_e = \gamma_E \Phi_E + (1 - \gamma_E) \Phi_P + \gamma_{NS} (\Phi_N - \Phi_S) + \gamma_{TB} (\Phi_T - \Phi_B). \quad (2.51)$$

Die Interpolationsgewichte sind hierbei ausschließlich geometrieabhängig und mit

$$\begin{aligned} \gamma_E &= \frac{x_{i,P} - x_{i,e}}{\mathcal{J}_e} \psi_e^{1i}, \\ \gamma_{NS} &= \frac{x_{i,P} - x_{i,e}}{\mathcal{J}_e} \psi_e^{2i}, \\ \gamma_{TB} &= \frac{x_{i,P} - x_{i,e}}{\mathcal{J}_e} \psi_e^{3i} \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \psi_e^{1i} &= \epsilon_{ikl} [(x_{k,N} - x_{k,S})(x_{l,T} - x_{l,B})], \\ \psi_e^{2i} &= \epsilon_{ikl} [(x_{k,T} - x_{k,B})(x_{l,E} - x_{l,P})], \\ \psi_e^{3i} &= \epsilon_{ikl} [(x_{k,E} - x_{k,P})(x_{l,N} - x_{l,S})], \\ \mathcal{J}_e &= (x_{i,E} - x_{i,P}) \psi_e^{1i} \end{aligned}$$

gegeben. Eine nachteilige Eigenschaft des CDS-Verfahrens ergibt sich jedoch aus seiner Neigung zu Oszillationen und damit zu unphysikalischen Lösungen, welche schließlich zur Instabilität des numerischen Verfahrens führen. Um eine beschränkte und stabile Lösung sicherzustellen, wird in FASTEST ein TVD-Limiter auf die konvektiven Flüsse der Skalartransportgleichungen angewendet, welcher in [117] vorgeschlagen wurde. Der TVD-Limiter stellt dabei eine Kombination des UDS-Verfahrens mit dem CDS-Verfahren dar, welcher zum einen die Oszillationsneigung des CDS-Verfahrens und zum anderen die numerische Diffusion des Aufwind-Differenzen-Verfahrens (UDS: upwind differencing scheme) verhindert, welche sich darauf begründet, dass das UDS-Verfahren lediglich erster Ordnung hinsichtlich seines Abbruchfehlers ist. Der Variablenwert auf der East-Zellfläche

wird dabei durch die Werte in den Nachbarzellzentren stromauf Φ_U , Φ_{UU} und stromab Φ_D der betrachteten Zelle entsprechend

$$\Phi_e = \Phi_U + \frac{|x_{i,e} - x_{i,U}|}{|x_{i,D} - x_{i,U}|} B(r) (\Phi_U - \Phi_{UU}) \quad (2.52)$$

berechnet. Hierbei entspricht $B(r)$ der nichtlinearen Fluss-Limiter-Funktion CHARM, welche mit

$$B(r) = \begin{cases} \frac{r(3r+1)}{(r+1)^2} & : r > 0 \\ 0 & : r \leq 0 \end{cases} \quad (2.53)$$

und dem Gradientenverhältnis

$$r = \frac{|x_{i,U} - x_{i,UU}|}{|x_{i,D} - x_{i,U}|} \frac{\Phi_D - \Phi_U}{\Phi_U - \Phi_{UU}} \quad (2.54)$$

gegeben ist. Die Fluss-Limiter-Funktion regelt hierbei die Interpolationsordnung derart, dass die Lösung stabil bleibt. Wenn der Gradient von Φ auf dem numerischen Gitter hinreichend aufgelöst ist, geht das Gradientenverhältnis r gegen eins und es ergibt sich ein lineares Aufwindverfahren zweiter Ordnung (so wie das CDS-Verfahren). Wenn Φ scharfe Variationen aufweist, welche nicht ausreichend aufgelöst werden können, so geht r nicht-linear gegen 0, sodass das Verfahren gegen ein reines Aufwindverfahren erster Ordnung konvergiert.

2.2.2.2 Diffusive Flüsse

Im Rahmen der Behandlung der diffusiven Flüsse wird der Diffusionskoeffizient Γ_Φ mithilfe der multilinearen Interpolation entsprechen Gleichung 2.52 für die Zelloberflächen ausgewertet. Die Berechnung der räumlichen Gradienten $\frac{\partial \Phi}{\partial x_i}$ benötigt die Transformation in das lokale Zellkoordinatensystem, welche mit

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x_i} = \frac{\beta^{ij}}{\mathcal{J}} \frac{\partial \Phi}{\partial \xi_j} \quad (2.55)$$

gegeben ist. Hierbei bezeichnet \mathcal{J} die Determinante der Jakobimatrix der Koordinatentransformation

$$\mathcal{J} = \det \left(\frac{\partial x_i}{\partial \xi_j} \right) = \begin{vmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial \xi_1} & \frac{\partial x_1}{\partial \xi_2} & \frac{\partial x_1}{\partial \xi_3} \\ \frac{\partial x_2}{\partial \xi_1} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi_2} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi_3} \\ \frac{\partial x_3}{\partial \xi_1} & \frac{\partial x_3}{\partial \xi_2} & \frac{\partial x_3}{\partial \xi_3} \end{vmatrix} \quad (2.56)$$

und β^{ij} die zugehörige Kofaktorenmatrix

$$\beta^{ij} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x_2}{\partial \xi_2} \frac{\partial x_3}{\partial \xi_3} - \frac{\partial x_3}{\partial \xi_2} \frac{\partial x_2}{\partial \xi_3} & \frac{\partial x_3}{\partial \xi_1} \frac{\partial x_2}{\partial \xi_3} - \frac{\partial x_2}{\partial \xi_1} \frac{\partial x_3}{\partial \xi_3} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi_1} \frac{\partial x_3}{\partial \xi_2} - \frac{\partial x_3}{\partial \xi_1} \frac{\partial x_2}{\partial \xi_2} \\ \frac{\partial x_3}{\partial \xi_2} \frac{\partial x_1}{\partial \xi_3} - \frac{\partial x_1}{\partial \xi_2} \frac{\partial x_3}{\partial \xi_3} & \frac{\partial x_1}{\partial \xi_1} \frac{\partial x_3}{\partial \xi_3} - \frac{\partial x_3}{\partial \xi_1} \frac{\partial x_1}{\partial \xi_3} & \frac{\partial x_3}{\partial \xi_1} \frac{\partial x_2}{\partial \xi_2} - \frac{\partial x_2}{\partial \xi_1} \frac{\partial x_3}{\partial \xi_2} \\ \frac{\partial x_1}{\partial \xi_2} \frac{\partial x_2}{\partial \xi_3} - \frac{\partial x_2}{\partial \xi_2} \frac{\partial x_1}{\partial \xi_3} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi_1} \frac{\partial x_2}{\partial \xi_3} - \frac{\partial x_2}{\partial \xi_1} \frac{\partial x_2}{\partial \xi_3} & \frac{\partial x_1}{\partial \xi_1} \frac{\partial x_2}{\partial \xi_2} - \frac{\partial x_2}{\partial \xi_1} \frac{\partial x_1}{\partial \xi_2} \end{bmatrix}. \quad (2.57)$$

Analog zu den konvektiven Flüssen wird eine multilineare Interpolationsmethode verwendet, welche in [57] vorgeschlagen wurde. Sie ist mit

$$\left(\frac{\partial \Phi}{\partial x_i}\right)_e = \frac{\psi_{e,DABT}^{ji}}{\mathcal{J}_{e,DABT}} \Phi_{e,DABT}^j \quad (2.58)$$

und

$$\begin{aligned} \Phi_{e,DABT}^1 &= (\Phi_E - \Phi_P), \\ \Phi_{e,DABT}^2 &= (\Phi_N - \Phi_S + \Phi_{NE} - \Phi_{SE}), \\ \Phi_{e,DABT}^3 &= (\Phi_T - \Phi_B + \Phi_{TE} - \Phi_{BE}), \\ \psi_{e,DABT}^{1i} &= \epsilon_{ikl}[(x_{k,N} - x_{k,S} + x_{k,NE} - x_{k,SE})(x_{l,T} - x_{l,B} + x_{l,TE} - x_{l,BE})], \\ \psi_{e,DABT}^{2i} &= \epsilon_{ikl}[(x_{k,T} - x_{k,B} + x_{k,TE} - x_{k,BE})(x_{l,E} - x_{l,P})], \\ \psi_{e,DABT}^{3i} &= \epsilon_{ikl}[(x_{k,E} - x_{k,P})(x_{l,N} - x_{l,S} + x_{l,NE} - x_{l,SE})], \\ \mathcal{J}_{e,DABT} &= (x_{i,E} - x_{i,P})\psi_{e,DABT}^{1i} \end{aligned}$$

gegeben.

2.2.3 Zeitliche Diskretisierung

Zuletzt müssen auch die instationären Terme des Differenzialgleichungssystems diskretisiert werden. Hierfür wird zunächst die allgemeine Skalartransportgleichung 2.42 kompakt als

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\Phi) = \mathcal{R}(\Phi) \quad (2.59)$$

notiert, wobei der konvektive und der diffusive Term sowie der Quellterm zur rechten Seite $\mathcal{R}(\Phi)$ zusammengefasst werden. $\mathcal{R}(\Phi)$ enthält hierbei alle bisher beschriebenen Approximationen. Die Auswertung von Gleichung 2.59 für das Zellzentrum entsprechend Gleichung 2.47 führt schließlich auf ein System gewöhnlicher Differenzialgleichungen, dessen transiente Terme auf der linken Seite numerisch integriert werden müssen. Hierfür wird in FASTEST ein Runge-Kutta-Verfahren zweiter Ordnung angewendet, welches auf einer dreistufigen Methode basiert. Hierbei wird die Variable Φ zum Zeitpunkt $n+1$, ausgehend von ihrem Wert zum Zeitpunkt n , über zwei Zwischenschritte berechnet. Dieses Vorgehen lässt sich in der Form

$$\Phi^{\text{RK},i} = \Phi^n + \alpha_{\text{RK},i} \Delta_t \mathcal{R}(\Phi^{\text{RK},i-1}), \quad i \in \{1, 2, 3\} \quad (2.60)$$

notieren, wobei

$$\alpha_{\text{RK},1} = \frac{1}{3}, \quad \alpha_{\text{RK},2} = \frac{1}{2}, \quad \alpha_{\text{RK},3} = 1 \quad (2.61)$$

als Gewichte der Zwischenschritte verwendet werden. Weiterhin ist $\Phi^{\text{RK},0} = \Phi^n$ und $\Phi^{\text{RK},3} = \Phi^{n+1}$ zu setzen, um die Berechnung des vollständigen Zeitschritts abzuschließen. Das hier beschriebene Verfahren führt zu einem vergleichsweise geringen Speicheraufwand (low-storage-scheme [115]), da neben einem vollendeten Zeitschritt lediglich eine

zusätzliche Zwischenebene gleichzeitig gespeichert werden muss. Der Zeitschritt wird entweder manuell entsprechend der räumlichen Auflösung und der abgebildeten Physik gewählt oder anhand nachfolgender Kriterien automatisch geregelt. Der stabile Bereich der Zeitintegration wird von zwei Kriterien begrenzt, wobei der dominierende Transportterm darüber entscheidet, welches Kriterium zuerst erreicht wird. Das erste Kriterium ist die Courant-Zahl [18]

$$\mathcal{C} = \frac{u\Delta t}{\Delta x}, \quad (2.62)$$

welche den Zeitschritt Δt mit der Auflösung des Gitters und der Konvektion in Zusammenhang bringt. Entsprechend den Herleitungen in [55] darf \mathcal{C} einen Wert von 1,73 nicht überschreiten, um die Stabilität der Zeitintegration zu gewährleisten. Dieses Kriterium ist vor allem in turbulenten Strömungen relevant, da diese durch Konvektion dominiert sind. Ein zweites Kriterium stellt die Diffusionszahl dar

$$\mathcal{D} = \frac{\mathcal{D}_\Phi \Delta t}{\Delta x^2}, \quad (2.63)$$

welche das beschränkende Kriterium in diffusionsdominierten Prozessen ist. Sie sollte einen Wert von 0,63 nicht überschreiten [55]. Wie anhand der Abhängigkeit des Kriteriums vom Quadrat der Auflösung zu sehen ist, kommt die Diffusionszahl vor allem bei feinen Gittern zum Tragen. Dies ist beispielsweise bei der Verwendung der Detaillierten Chemie der Fall, bei welcher die Quellterme der Zwischenspezies hohe Anforderungen an die Auflösung des Gitters stellen. Wie erwähnt, ist es möglich, die Zeitschrittweite automatisch zu regeln, wobei dies in dieser Arbeit auf Basis der Diffusionszahl vorgenommen wurde. Die iterative Regelungsvorschrift für die Zeitschrittweite Δt ist mit

$$\Delta t^{n+1} = \Delta t^n \cdot \left(1 + \alpha_{\mathcal{D}} \frac{\mathcal{D}_{\text{soll}} - \mathcal{D}^n}{\mathcal{D}^n} \right) \quad (2.64)$$

gegeben, sodass $\mathcal{D}_{\text{soll}}$ angestrebt wird. Hierbei wird eine Abschätzung der optimalen Zeitschrittweite aus der Diffusionszahl des letzten Zeitschritts vorgenommen. Bei stationären Simulationen konvergiert \mathcal{D} gegen $\mathcal{D}_{\text{soll}}$. Der Regelparameter $\alpha_{\mathcal{D}}$ wurde im Rahmen dieser Arbeit zu 0,1 gewählt, um eine schnelle Konvergenz der Diffusionszahl und ein stabiles Regelverhalten zu erzielen.

2.2.4 Druckkorrekturverfahren

Die Gleichungen 2.1 und 2.2 bilden zusammen mit Gleichung 2.3 ein System aus vier Gleichungen (drei für jede Komponente des Impulses und eine für die Massenerhaltung), sodass grundsätzlich genügend Gleichungen zur Lösung der drei Geschwindigkeitskomponenten und des Drucks zur Verfügung stehen. Aufgrund der Inkompressibilitätsannahme ist jedoch die Dichte druckunabhängig, sodass die Kontinuitätsgleichung vom Druck entkoppelt ist. Zur Bestimmung der Druckgradienten, welche in Gleichung 2.2 auftreten, wird deshalb ein Druckkorrekturverfahren [17] verwendet. Dieses wird nachfolgend erläutert. Entsprechend dem Runge-Kutta-Verfahren gegeben durch Gleichung 2.60 kann die

Impulserhaltungsgleichung gemäß

$$(\rho u_j)^{\text{RK},i} = (\rho u_j)^n + \alpha_{\text{RK},i} \Delta_t \left(C^{\text{RK},i-1} + D^{\text{RK},i-1} - \frac{\partial p^{\text{RK},i}}{\partial x_j} \right) \quad (2.65)$$

integriert werden. Hierbei wurde der konvektive Term mit C und der diffusive Term mit D abgekürzt. Das Druckfeld, welches für die Druckgradienten im letzten Term von Gleichung 2.65 benötigt werden, sind zur Zeitebene RK,i unbekannt, sodass hier das Druckfeld der Zeitebene $\text{RK},i-1$ verwendet werden muss

$$(\rho u_j)^{*,\text{RK},i} = (\rho u_j)^n + \alpha_{\text{RK},i} \Delta_t \left(C^{\text{RK},i-1} + D^{\text{RK},i-1} - \frac{\partial p^{\text{RK},i-1}}{\partial x_j} \right). \quad (2.66)$$

Hierbei ergibt sich ein vorläufiges Geschwindigkeitsfeld für die Zeitebene RK,i , welches nicht die Kontinuitätsgleichung erfüllt und mit $*$ gekennzeichnet wird. Führt man die Korrektur für den Druck p'

$$p^{\text{RK},i} = p^{\text{RK},i-1} + p' \quad (2.67)$$

sowie die Korrektur für den Impuls

$$(\rho u_j)^{\text{RK},i} = (\rho u_j)^{*,\text{RK},i} + (\rho u_j)' \quad (2.68)$$

in Gleichung 2.65 ein und subtrahiert man 2.65 von 2.66, so ergibt sich

$$(\rho u_j)' = -\alpha_{\text{RK},i} \Delta_t \frac{\partial p'}{\partial x_j}. \quad (2.69)$$

Ersetzt man den Impuls in der Kontinuitätsgleichung entsprechend

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0 \quad (2.70)$$

durch Gleichung 2.68, so ergibt sich zunächst

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j)^{*,\text{RK},i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j)' = 0. \quad (2.71)$$

Wird schließlich die Impulskorrektur durch Gleichung 2.69 ersetzt, erhält man die Druckkorrekturgleichung als Poisson-Gleichung in ihrer finalen Form:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial p'}{\partial x_j} \right) = \frac{1}{\alpha_{\text{RK},i} \Delta_t} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j)^{*,\text{RK},i} \right) \quad (2.72)$$

Gleichung 2.72 lässt sich schließlich gemäß den Approximationen, welche in Abschnitt 2.2.2 vorgestellt wurden, diskretisieren, sodass sich

$$\sum_c \left(\frac{\partial p'}{\partial x_j} n_i \right) \bigg|_c \delta A_c = \frac{1}{\alpha_{\text{RK},i} \Delta_t} \underbrace{\left(\frac{\partial \rho}{\partial t} \bigg|_P \delta V + \sum_c \left((\rho u_j)^{*,\text{RK},i} n_j \bigg|_c \delta A_c \right) \right)}_{\epsilon_{in}} \quad (2.73)$$

ergibt, wobei ϵ_m den Massendefekt der Kontinuität bezeichnet. Mithilfe der Diskretisierung lässt sich ein algebraisches Gleichungssystem für das gesamte Rechengebiet aufstellen. Dieses lässt sich iterativ für p' lösen, wobei ϵ_m als Konvergenzkriterium dient. Aufgrund der Blockstruktur des numerischen Gitters führt die Poisson-Gleichung zu einer Sieben-Diagonalmatrix für jeden einzelnen Block, da lediglich benachbarte Zellen miteinander in Beziehung gebracht werden. Diese Form des Gleichungssystems lässt sich effizient mithilfe der unvollständigen LU-Zerlegung (ILU: incomplete Upper Lower Matrix Decomposition) lösen. Diese Zerlegung wird in FASTEST auf Basis des SIP-Lösers (SIP: Strongly Implicite Procedure) umgesetzt, wie er in [108] vorgeschlagen wurde. Detailliertere Informationen können [58] und [59] entnommen werden.

2.2.5 Randbedingungen

Das beschriebene Differenzialgleichungssystem wird erst durch Vorgabe von Anfangs- und Randbedingungen eindeutig lösbar. Letztere werden für alle transportierten Größen, d. h. Geschwindigkeit, Enthalpie und andere Skalare, an allen Gebietsrändern benötigt. In FASTEST stehen hierbei zwei Typen von Randbedingungen zur Verfügung. Zunächst ist dies die Dirichlet-Randbedingung, bei welcher der Variablenwert am Gebietsrand direkt vorgegeben wird

$$\Phi = \Phi_{\text{RB}}. \quad (2.74)$$

Da für reale Konfigurationen und experimentelle Brenner typischerweise Temperaturrandbedingungen anstelle von Enthalpierandbedingungen zur Verfügung stehen, wird die Enthalpierandbedingung über die vorgegebene Temperatur sowie den zugehörigen chemischen Zustand erhalten. Der zweite Randbedingungstyp ist die Neumann-Randbedingung, bei welcher der Gradient normal zum Gebietsrand festgelegt wird

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x_i} n_i = b_{\text{RB}}. \quad (2.75)$$

Randbedingungen müssen für alle Einlässe, Auslässe, feste Wände und Symmetrieränder festgelegt werden, wie nachfolgend detailliert wird.

2.2.5.1 Die Einlassrandbedingungen

An den Einlässen des Rechengebiets wird für alle Variablen die Dirichlet-Randbedingung verwendet. Hierbei können die Geschwindigkeitskomponenten, die Temperatur und die Skalare zeit- und ortsabhängig vorgegeben werden. Wie schon erwähnt, ergibt sich die Randbedingung für die Enthalpie aus der Temperaturreandbedingung und dem chemischen Zustand, welcher über die Skalare festgelegt ist. Über zeitabhängige Geschwindigkeitsrandbedingungen kann beispielsweise eine turbulente Einlassströmung realisiert werden, wobei hier auf eine physikalisch konsistente Berechnung der Fluktuation geachtet werden muss. Dies wird beispielsweise mithilfe des Inflow-Generators von Klein [53] gewährleistet. In dieser Arbeit werden ausschließlich laminare Strömungen betrachtet, deren Einlassrandbedingungen im Rahmen der jeweiligen Beschreibung der Konfiguration besprochen wird.

2.2.5.2 Die Auslassrandbedingungen

An den Auslässen wird für alle Skalare einschließlich der Enthalpie die Neumann-Randbedingung verwendet. Der vorzugebende Gradient wird hierbei zu null gesetzt. Auch für die Geschwindigkeit kann diese Randbedingung gewählt werden, wobei dies für den Fall von Rückströmungen oder Wirbel in der Nähe des Auslasses zu Instabilitäten führen kann [24]. Eine stabilere Alternative stellt die konvektive Auslassrandbedingung dar. Hierbei wird das Frozen-Turbulence-Konzept verwendet, wie es in [94] vorgeschlagen wurde. Hierbei wird eine vorzugebende Geschwindigkeit u_{aus} genutzt, welche als zeitlich gemittelte Geschwindigkeit gedacht werden muss. Mit ihrer Hilfe wird die Konvektion von Geschwindigkeitsfluktuationen durch den Auslass berechnet. Dies wird durch Nullsetzen der materiellen Ableitung der Normalengeschwindigkeit u_n entsprechend

$$\frac{\partial u_n}{\partial t} + u_{\text{aus}} \frac{\partial u_n}{\partial x_i} n_i = 0 \quad (2.76)$$

beschrieben. Das berechnete Normalengeschwindigkeitsprofil u_n wird schließlich so skaliert, dass die globale Massenerhaltung gewährleistet bleibt.

2.2.5.3 Wände und Symmetrierandbedingungen

An Wänden wird für die Geschwindigkeit die Dirichlet-Randbedingung genutzt. Die Normalkomponente ist dabei grundsätzlich null, da keine Massenflüsse durch die Wand erlaubt sind. Weiterhin gilt an den Wänden die Haftbedingung, welche zu einer Tangentialgeschwindigkeit von null führt, da sich die Wände im Rahmen dieser Arbeit nicht bewegen. Die Temperatur wird an Wänden entsprechend der Dirichlet-Randbedingung als Wert vorgegeben, wohingegen für Skalare, welche nicht durch die Wand diffundieren können, die Nullgradientrandbedingung gilt.

Bei der Anwendung der Symmetrierandbedingung wird für alle Variablen eine Nullgradientrandbedingung verwendet. Sie unterbindet jegliche Skalar-, Massen- oder Enthalpieflüsse normal zum Gebietsrand. Weiterhin gilt an Symmetrierandbedingungen keine Haftbedingung, sodass hiermit reibungsfreie Wände abgebildet werden können. Ferner besteht die Möglichkeit, adiabate Wänden abzubilden, welche zwar hinsichtlich der Strömung Dirichlet-Randbedingungen nutzen, aber für die Enthalpie undurchlässig sind.

Kapitel 3

Mathematische Beschreibung der Verbrennungschemie

Verbrennung ist ein Prozess, bei dem die im Brennstoff enthaltene chemisch gebundene Energie über eine Vielzahl von chemischen Reaktionen in Wärme gewandelt wird. Diese kann dann als solche zur Beheizung von Gebäuden, als Prozesswärme für chemische Reaktoren oder zur Erzeugung von Arbeit genutzt werden. Entsprechende Anwendungen für die Erzeugung von Arbeit sind beispielsweise Verbrennungsmotoren und Gasturbinen. In diesem Kapitel werden zunächst die Grundlagen der Verbrennung gasförmiger Brennstoffe erläutert. Es werden die Charakteristika der Methan-Luft-Verbrennung besprochen und auf verschiedene Flammentypen eingegangen. Weiter schließt sich die theoretische Beschreibung der Verbrennung anhand chemischer Reaktionsmechanismen sowie die Einführung etablierter Chemiereduktionsmethoden an.

3.1 Chemische Reaktionen

Im Folgenden wird das Prinzip der Verbrennung anhand eines Gasgemischs aus den Spezies A_2 und B_2 veranschaulicht. Die Moleküle des Gases bewegen sich zufällig gemäß der Braun'schen Molekularbewegung, wobei ihre kinetische Energie von der Temperatur des Gases abhängt. Kommt es bei dieser Bewegung zu einer Kollision von A_2 und B_2 und überschreiten sie dabei die sogenannte Aktivierungsenergie, so kommt es zur Reaktion, sodass die dritte Spezies AB entsteht



Chemische Reaktionen dieser Art sind entweder mit Wärmefreisetzung (exotherme Reaktion) oder mit einer Wärmeaufnahme verbunden (endotherme Reaktion). Diese als Reaktionsenthalpie Δh_R bezeichnete Wärme ergibt sich aus der Differenz der Bildungsenthalpie der Produkte und der Edukte. Ist Δh_R negativ, so ist die Reaktion exotherm

$$\Delta h_R = \Delta h_{f,2AB} - (\Delta h_{f,A_2} + \Delta h_{f,B_2}). \quad (3.2)$$

Bei der Verbrennung von gasförmigen Brennstoffen, wie beispielsweise Methan und Luft, kommt es zur Ausbildung einer Flamme. Ein charakteristisches Phänomen von Flammen ist es, dass die zur Aktivierung von chemischen Reaktionen erforderliche Energie durch die frei gewordene Wärme von bereits abgeschlossenen Reaktionen bereitgestellt wird. An dieser Stelle tritt die Relevanz der Reaktionsgeschwindigkeit hervor. Sie muss in Bezug zur

Wärmediffusion einen gewissen Grenzwert überschreiten, damit genügend Aktivierungsenergie für nachfolgende Reaktionen vorhanden ist. Für das obige Beispiel wird hier die Reaktionsrate r eingeführt, welche die zeitliche Änderung der Spezieskonzentrationen beschreibt. Über die Elementerhaltung (Erhaltung der Atome) ergeben sich Verknüpfungen zwischen den Änderungsraten der einzelnen Spezies

$$r_{\text{fr}} = \frac{dc_{A_2}}{dt} = \frac{dc_{B_2}}{dt} = -\frac{dc_{AB}}{dt}. \quad (3.3)$$

Die Wahrscheinlichkeit einer Kollision der Moleküle A_2 und B_2 ist proportional zur Anzahl der Moleküle A_2 sowie zur Anzahl der Moleküle B_2 in einem gegebenen Volumen. Dies führt auf den Zusammenhang

$$r_{\text{fr}} = k_{\text{fr}} c_{A_2} c_{B_2} \quad (3.4)$$

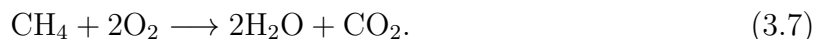
für die Reaktion von links nach rechts entsprechend Gleichung 3.1 (Hinreaktion). Da für die Reaktion lediglich zwei Kollisionspartner erforderlich sind, spricht man von einer Reaktion zweiter Ordnung. Die Wahrscheinlichkeit einer Reaktion sinkt mit zunehmender Ordnung, also Anzahl der notwendigen Kollisionspartner, was sich mathematisch durch weitere Multiplikatoren in Gleichung 3.4 äußern würde. Wie eingangs erwähnt, muss für die Reaktion im Falle einer Kollision die Aktivierungsenergie E_a überschritten werden. Hierdurch ergibt sich die Abhängigkeit des Geschwindigkeitskoeffizienten k_{fr} von der Temperatur und der Aktivierungsenergie in Form des Arrhenius-Gesetzes [112]

$$k_{\text{fr}} = A_{\text{fr}} T^b \exp(-E_a/RT). \quad (3.5)$$

In chemisch reagierenden Systemen finden meist Hin- und Rückreaktionen gleichzeitig statt. Befindet sich das System im Gleichgewicht sind die Raten der Hin- und Rückreaktion gleich groß. Werden die Geschwindigkeitskoeffizienten in diesem Zustand aufeinander bezogen, erhält man die Gleichgewichtskonstante [112]

$$k_c = \frac{k_{\text{fr}}}{k_{\text{br}}}. \quad (3.6)$$

Zur makroskopischen Beschreibung der Verbrennung eines Brennstoffs mit einem Oxidator wird häufig lediglich eine Globalreaktion angegeben. Diese fasst die hauptsächlichen Stoffumsätze zu einer Reaktionsgleichung zusammen und lässt zum einen das Auftreten von Zwischenspezies als auch das Verbleiben von Produkten geringer Konzentrationen außer Acht. Dennoch können mithilfe der Globalreaktion beispielsweise die stöchiometrische Mischung und die Gesamtwärmefreisetzung abgeschätzt werden. Als Beispiel für eine solche Globalreaktion sei die für diese Arbeit wichtige Reaktion von Methan mit Sauerstoff zu Wasser und Kohlendioxid dargestellt [69]



Tatsächlich ist das Ablaufen der Globalreaktion, bei welcher Methan alle Verbindungen zu seinem Wasserstoff auf einmal aufbrechen müsste, sehr unwahrscheinlich. Zur schrittweisen Zerlegung des Methans ist hingegen eine vergleichsweise geringe Energie erforderlich. Eine deutlich wahrscheinlicher und damit auch real ablaufende Reaktion ist mit



gegeben. Sie wird als Elementarreaktion bezeichnet und stellt zusammen mit einer Vielzahl von weiteren Elementarreaktionen einen Reaktionsmechanismus dar. Er beinhaltet viele Spezies, welche nicht in der Globalreaktion auftauchen, aber sich entscheidend auf globale Eigenschaften der Flamme auswirken. Erst die Betrachtung von Elementarreaktionen, welche die tatsächliche Chemie in einer Flamme abbilden, ermöglicht die Berechnung von Reaktionsraten, welche beispielsweise die Flammengeschwindigkeit beeinflussen. Auch das Auftreten von Schadstoffen wie Stickoxide (NO_x) und Kohlenmonoxid (CO) können nur im Rahmen einer detaillierten Betrachtung der Elementarreaktionen erklärt werden. Allgemein lässt sich ein Reaktionsmechanismus in Form von N_r chemischen Reaktionsgleichungen ausdrücken, welche insgesamt N_s Spezies \mathcal{X}_k berücksichtigt. Die stöchiometrischen Koeffizienten der Edukte $\nu'_{k,j}$ und Produkte $\nu''_{k,j}$ stellen dabei die Elementerhaltung sicher

$$\sum_{k=1}^{N_s} \nu'_{k,j} \mathcal{X}_k \rightleftharpoons \sum_{k=1}^{N_s} \nu''_{k,j} \mathcal{X}_k \quad \text{mit} \quad j = 1, \dots, N_r. \quad (3.9)$$

Für jede dieser Reaktionen lässt sich nun eine Nettoreaktionsrate als Differenz der Hin- und Rückreaktion

$$r_j = k_{\text{fr},j} \prod_{k=1}^{N_s} c_k^{\nu'_{k,j}} - k_{\text{br},j} \prod_{k=1}^{N_s} c_k^{\nu''_{k,j}} \quad \text{mit} \quad j = 1, \dots, N_r \quad (3.10)$$

berechnen. Sie summieren sich nach

$$\dot{\omega}_k = \sum_{j=1}^{N_r} (\nu''_{k,j} - \nu'_{k,j}) r_j \quad \text{mit} \quad k = 1, \dots, N_s \quad (3.11)$$

zu einem Quellterm für jede Spezies auf, welche in den Speziestransportgleichungen benötigt werden. Die Berechnung der Geschwindigkeitskoeffizienten, welche nach 3.5 erfolgt, erfordert dabei die Kenntnis des präexponentiellen Faktors A_{fr} , des Temperaturexponenten b und der Aktivierungsenergie E_a . Diese sind Teil der Reaktionsmechanismen, deren Entwicklung eine Vielzahl von Experimenten wie Zündverzugszeit- und Speziesprofilmessungen in Stoßrohrexperimenten sowie Messungen der laminaren Flammgeschwindigkeit erfordern.

3.1.1 Flammentypen

Bei der Verbrennung gasförmiger Brennstoffe wird zwischen zwei grundlegenden generischen Flammentypen unterschieden. Zum einen gibt es die Diffusionsflamme, bei welcher der Brennstoff und der Oxidator voneinander getrennt in den Brennraum zugeführt werden. In einem relativ kleinen Gebiet kommt es zum diffusiven Vermischen der Stoffströme, und eine Flamme stabilisiert sich in der Nähe des stöchiometrischen Punkts. Dem gegenüber stehen vorgemischte Flammen, bei welchen Brennstoff und Oxidator zunächst ideal gemischt und schließlich gezündet werden. Für beide Verbrennungsmoden ergeben sich charakteristische Eigenschaften der Flammen und entsprechende Herausforderungen, die bei der Auslegung eines Brenners berücksichtigt werden müssen. In den meisten Brennern treten die genannten Flammentypen nicht in Reinform auf, sondern existieren parallel oder bilden kombinierte Moden. Eine wesentliche Größe hierbei ist der Mischungsgrad f ,

welcher das Mischungsverhältnis zwischen Brennstoff und Oxidator beschreibt. Er lässt sich nach Gleichung 3.12 definieren, sodass er für reinen Brennstoff 1 und für reinen Oxidator 0 wird. Durch die Definition anhand der Elementmassenbrüche Z_C und Z_H von Kohlenstoff und Wasserstoff ist er über die gesamte Flamme hinweg wohldefiniert. Ein ausgezeichneter Wert des Mischungsgrads stellt die stöchiometrische Mischung dar. Sie ist im Falle der Methanverbrennung entsprechend Gleichung 3.7 gegeben, wenn für jedes Methanmolekül zwei Sauerstoffmoleküle zur Verfügung stehen. Dies ist bei Luft als Oxidator bei einem Wert von etwa $f = 0.055$ gegeben

$$f = Z_C + Z_H. \quad (3.12)$$

Weitere wichtige Werte des Mischungsgrads sind die Zündgrenzen. Sie werden erreicht, wenn entweder zu wenig Oxidator oder zu wenig Brennstoff für die Erhaltung der Flamme vorhanden ist [30]. Die untere Grenze des Mischungsgrads wird als magere (f_m) und die obere als fette (f_f) Zündgrenze bezeichnet. Nachfolgend werden die wesentlichen Eigenschaften der generischen Flammentypen erläutert.

3.1.1.1 Diffusionsflammen

Bei Diffusionsflammen wird Brennstoff und Oxidator voneinander getrennt zugeführt. Abbildung 3.1 (links) zeigt eine Gegenstromkonfiguration, welche durch die Streckungsrate entsprechend

$$a = \frac{u_{Br} + u_{Ox}}{H} \quad (3.13)$$

charakterisiert ist. Hierbei bezeichnen u_{Br} und u_{Ox} die Geschwindigkeiten der Stoffströme an den Einlässen des Gebiets und H den Abstand dieser Einlässe. Die Streckungsrate bestimmt maßgeblich, wie stark die Flamme gestaucht wird. Abbildung 3.1 (rechts) zeigt

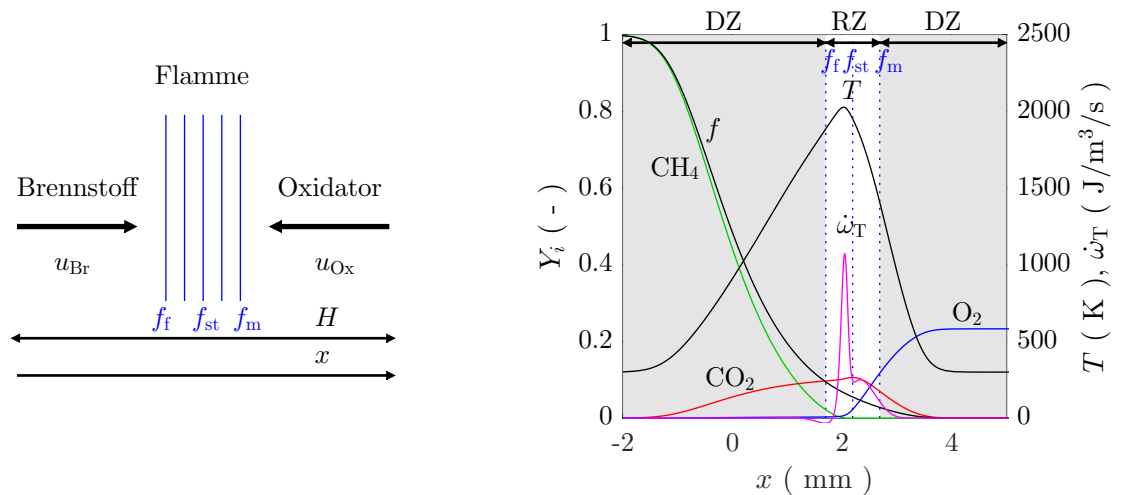


Abbildung 3.1: Diffusionsflamme: Schemazeichnung mit Zündgrenzen (links) und Profile einiger Spezies, des Mischungsgrads, der Temperatur und der Wärmefreisetzungsrate (rechts).

die Flammenstruktur anhand einiger Spezies und der Temperatur für eine Streckungsrate

von $a = 100/\text{s}$. Die beiden Diffusionszonen der Flamme außerhalb der Zündgrenzen sind grau unterlegt. Dort findet die diffusive Vermischung der Stoffströme statt, sodass eine brennbare Mischung entsteht. Dazwischen befindet sich die Reaktionszone, welche alle Mischungsgrade innerhalb der Zündgrenzen einschließlich der stöchiometrischen Mischung enthält. In dieser Region nimmt die ebenfalls gezeigte Wärmefreisetzungsrateseinen Maximalwert an. Da die Reaktionen nur in einem kleinen Gebiet stattfinden können, lässt sich die Position der Flamme leicht über die Geschwindigkeiten der Stoffströme festlegen. Hinsichtlich der Flammenstabilität ist dies ein wesentlicher Vorteil von Diffusionsflammen gegenüber Vormischflammen.

3.1.1.2 Vormischflammen

Bei Vormischflammen werden Brennstoff und Oxidator in einem zündfähigen Verhältnis miteinander vermischt, bevor sie in der Flamme zu Produkten umgesetzt werden. Abbildung 3.2 (links) zeigt dies schematisch anhand von Isolinien einer normierten Kon-

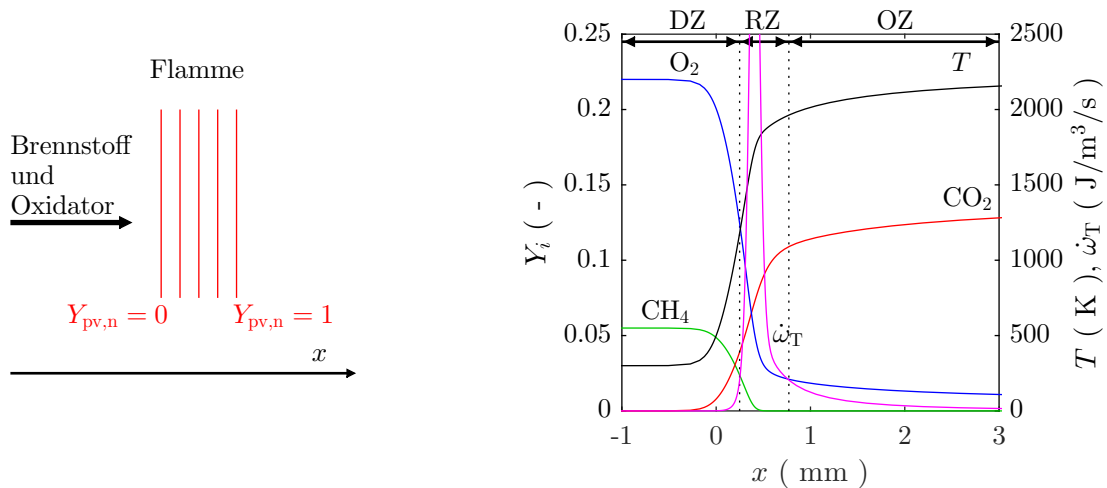


Abbildung 3.2: Vormischflamme: Schemazeichnung mit Isolinien der normierten Fortschrittsvariablen (links) und Profile einiger Spezies, der Temperatur und der Wärmefreisetzungsrates (rechts).

trollvariablen $Y_{pv,n}$, welche den Reaktionsfortschritt abbildet und von 0 im Frischgas zu 1 auf der Produktseite ansteigt. Abbildung 3.2 (rechts) zeigt wiederum einige Speziesverläufe und die Temperatur als Profil über die Flamme, wobei hier drei Flammenzonen zu unterscheiden sind. In der Diffusionszone (DZ) wird das Gasgemisch vorgewärmt und erhält dabei Wärme aus der Reaktionszone (RZ). In der Reaktionszone, in welcher die Aktivierungsenergie überschritten wird, finden die meisten Reaktionen und ein Großteil der Wärmefreisetzung statt. Diese ist ebenfalls in Abbildung 3.2 (rechts) dargestellt. In der Oxidationszone finden schließlich langsame Reaktionen wie die Oxidation von Stickstoff statt, bis das chemische Gleichgewicht erreicht wird. Im Gegensatz zu Diffusionsflammen weisen Vormischflammen eine Flammengeschwindigkeit auf, welche von den thermodynamischen Bedingungen und dem Mischungsgrad abhängt. Für Methan wird die Flammengeschwindigkeit, wie auch die adiabate Flammentemperatur, etwa bei dem stöchio-

metrischen Mischungsgrad maximal. Die Flammendicke erreicht dabei ihren Minimalwert. Die Abhängigkeit der adiabaten Flammentemperatur ermöglicht Verbrennungskonzepte, bei welchen hohe Temperaturen durch sogenannte Magerverbrennung vermieden werden, um die Bildung von Stickoxiden zu minimieren. Dies stellt einen wesentlichen Vorteil gegenüber Diffusionsflammen dar, bei welcher inhärent Verbrennung bei stöchiometrischen Bedingungen und entsprechend hoher Temperatur stattfindet. Nachteile ergeben sich allerdings durch die schwerer zu realisierende Flammenstabilisierung. Da das zündfähige Gemisch nicht nur in der Flamme selbst vorliegt, sondern einen größeren Bereich vor der Flamme füllt, besteht die Gefahr des Flammenrückschlags, welcher besondere Maßnahmen zur Stabilisierung erfordert.

3.2 Detaillierte Chemie

Im Rahmen der Detaillierten Chemie ist entsprechend des verwendeten Chemiemechanismus für jede Spezies eine Transportgleichung entsprechend 2.5 zu lösen. Die Diffusion der Spezies wird dabei entweder unter Ausnutzung der Annahme $Lewis = 1$ oder auf Basis der Mixture-Averaged-Diffusionsbehandlung berechnet. Eine detaillierte Beschreibung der Implementierungen ist in [68] zu finden. Nachfolgend soll jedoch ein Überblick über die verwendeten Chemiemechanismen und die in dieser Arbeit geleistete Implementierung des Soret-Effekts gegeben werden.

3.2.1 Berechnung chemischer Quellterme

Der chemische Quellterm, welcher in Gleichung 2.5 auftritt, wird entsprechend den Gleichungen 3.10 und 3.11 berechnet. Da die Geschwindigkeitskoeffizienten k_{fr} für die verschiedenen Reaktionen um mehrere Größenordnungen variieren, handelt es sich dabei um ein steifes Differenzialgleichungssystem. Das Lösen dieses Systems erfordert deutlich kleinere Zeitschritte als die Zeitintegration der Erhaltungsgleichungen. Für ein effizientes Verfahren wird die Zeitintegration des Quellterms von der Integration der Transportgleichung entkoppelt und ein implizites Verfahren verwendet. Der Geschwindigkeitskoeffizient k_{br} wird entsprechend Gleichung 3.6 über die Gleichgewichtskonstante k_c berechnet, die ihrerseits mit

$$k_{c,j} = RT \cdot \left(\frac{p_a}{RT} \right)^{\sum_{k=1}^{N_s} \nu_{kj}} \exp \left(\frac{-\Delta_R G_j^0}{RT} \right) \quad (3.14)$$

gegeben ist. Die Änderung der Gibbs-Enthalpie, welche sich bei der betrachtete chemische Reaktion ergibt, lässt sich mit den Enthalpien und Entropien der Edukte bzw. Produkte berechnen, wobei hierfür von isothermen Bedingungen ausgegangen wird

$$\Delta_R G_j^0 = \Delta_R H_j - T \Delta_R S_j, \quad (3.15)$$

$$\Delta_R H_j = \sum_{k=1}^{N_s} (\nu''_{k,j} - \nu'_{k,j}) h_k, \quad (3.16)$$

$$\Delta_R S_j = \sum_{k=1}^{N_s} (\nu''_{k,j} - \nu'_{k,j}) s_k \quad \text{mit} \quad j = 1, \dots, N_r. \quad (3.17)$$

Die Enthalpie und die Entropie lassen sich für die einzelnen Spezies in Abhängigkeit der Temperatur mithilfe der Polynomkoeffizienten [11, 12, 67] berechnen.

3.2.2 Chemiemechanismen

Chemiemechanismen enthalten neben den stöchiometrischen Koeffizienten der Reaktionsgleichungen die Arrhenius-Parameter zur Berechnung der Geschwindigkeitskonstanten. In dieser Arbeit wurde ausschließlich die Verbrennung von Methan mit Luft betrachtet, wofür zwei Reaktionsmechanismen verwendet wurden. Dies ist zum einen der reduzierte C1-Mechanismus von Smooke und Giovangigli [102], welcher 25 Reaktion mit 16 Spezies umfasst. Stickstoff (N_2) tritt als inerte Spezies nicht in den Reaktionen auf, sodass eine Simulation auf Basis des Smooke-Mechanismus keine Vorhersagen hinsichtlich der Bildung von Stickoxiden erlaubt. Neben dem Smooke-Mechanismus wird im Rahmen dieser Arbeit der deutlich umfangreichere GRI3.0-Mechanismus verwendet, welcher von [100] entwickelt wurde. Er umfasst 325 Reaktionsgleichungen bei 53 Spezies und berücksichtigt die Bildung von Stickstoffverbindungen sowie die Bildung von C3-Verbindungen. In beiden Fällen wird Stickstoff zur Korrektur der Ungenauigkeiten genutzt, welche sich durch die Approximation der Diffusionsgeschwindigkeiten entsprechend der Gleichungen 2.28 bzw. 2.29 ergeben. Aufgrund des großen Massenanteils von Stickstoff bleibt sein Fehler hierdurch vernachlässigbar.

3.2.3 Implementierung des Soret-Effekts

Wie in Abschnitt 2.1.6 dargelegt wurde, wirkt sich der Soret-Effekt im Rahmen von Verbrennungsprozessen vor allem auf kleine Spezies wie H und H_2 sowie das Wassermolekül aus [111]. Zudem verstärkt sich sein Effekt mit zunehmender Temperatur [87]. In dieser Arbeit wird der Einfluss des Soret-Effekts auf die Kohlenmonoxidverteilung im Kontext der FWI untersucht, um seine Relevanz hinsichtlich der in Kapitel 5 beschriebenen Modellentwicklung zu bewerten.

Zur Berücksichtigung des Soret-Effekts wird die bestehende Implementierung des Diffusionsterms, welche von Meier [68] im FASTEST-Code entsprechend Gleichung 2.28 vorgenommen wurde, im Rahmen dieser Arbeit zu Gleichung 2.19 erweitert.

Die hinzukommenden Diffusionskoeffizienten \mathcal{D}_k^T lassen sich entsprechend der Gleichungen 2.22, 2.23 und 2.24 berechnen. Zur Überprüfung der Implementierungen steht der eindimensionale Detaillierte-Chemie-Löser CHEM1D [16] zur Verfügung, welcher eine Berücksichtigung des Soret-Effekts zulässt. Da CHEM1D eine von Gleichung 2.22 abweichende Berechnung des Diffusionskoeffizienten nutzt, kann nachfolgend gezeigter Vergleich der Lösungen nicht als exakte Verifikation betrachtet werden, sondern dient lediglich der Plausibilisierung der Implementierungen.

Zum Vergleich wird eine frei propagierende Methan-Luft-Vormischflamme bei stöchiometrischen Bedingungen und einer Frischgastemperatur von 300 K simuliert. Die Gitterauflösung der Simulation mit FASTEST beträgt etwa $20 \mu m$ über das gesamte eindimensionale Gebiet, wobei der GRI3.0-Mechanismus verwendet wird. Abbildung 3.3 zeigt sowohl den molekularen diffusiven Fluss $\rho Y_k \frac{\mathcal{D}_k}{\partial X_k} \frac{\partial X_k}{\partial x_j}$ als auch den thermodiffusiven Fluss $\frac{\mathcal{D}_k^T}{T} \frac{\partial T}{\partial x_j}$ für einige Spezies als räumlicher Verlauf über die Flamme. Zur Orientierung sind weiterhin die

normierte Temperatur und die zugehörigen normierten Speziesmassenbrüche eingezeichnet. Wie anhand der Verläufe des molekularen Diffusionsterms zu sehen ist, wirkt dieser

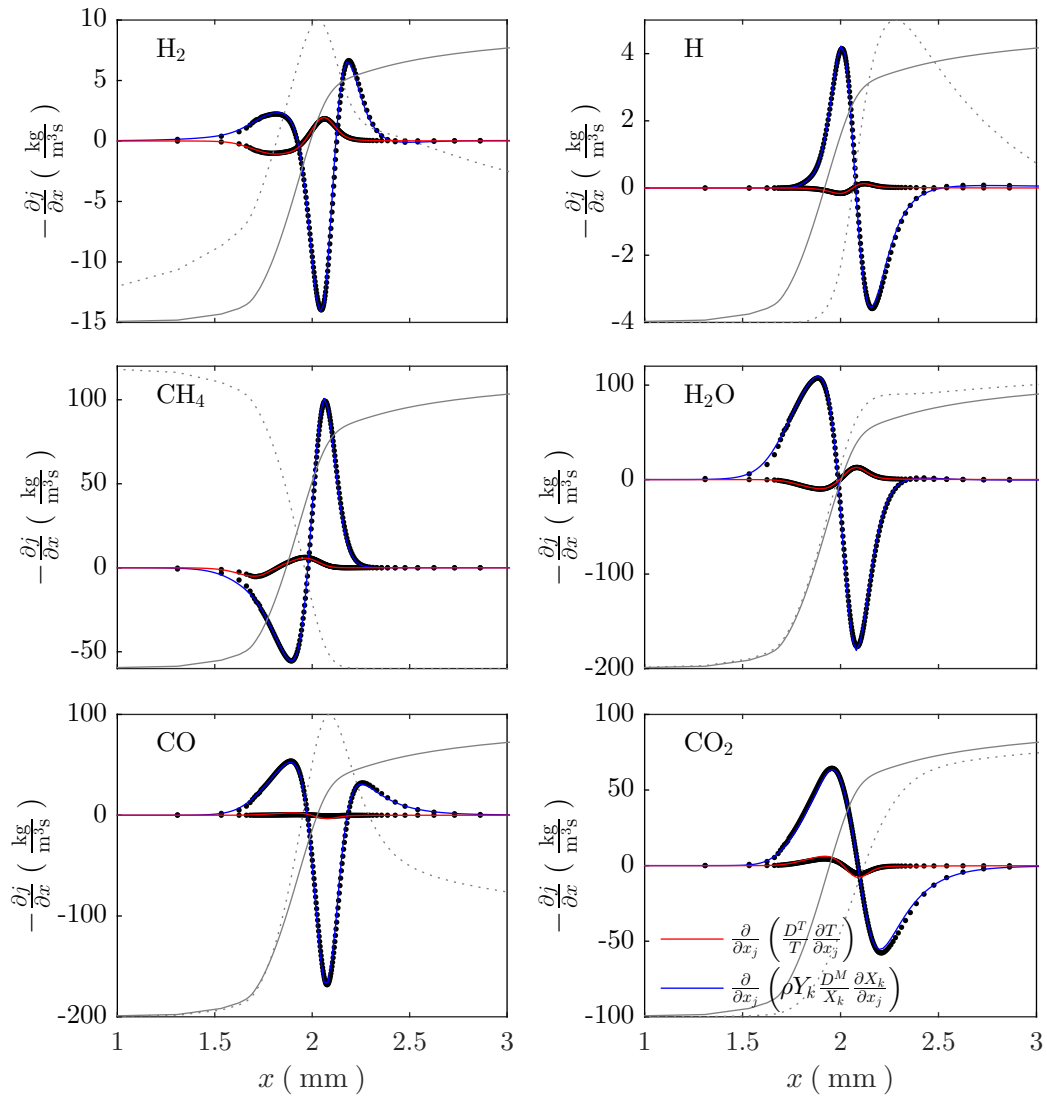


Abbildung 3.3: Molekularer Diffusionsterm und Thermodiffusionsterm entlang einer frei propagierenden Flamme, sowie die normierte Temperatur in grau und normierter Speziesmassenbruch in grau gepunktet.

grundsätzlich glättend auf den Speziesverlauf. Die Übereinstimmung der Simulationsergebnisse mit der Referenzlösung des CHEM1D-Lösers ist für alle Spezies zufriedenstellend gegeben. Bei Betrachtung der Verläufe des Thermodiffusionsterms wird ersichtlich, dass dieser für H_2 , H , H_2O eine aufsteilende Wirkung und für CH_4 und CO_2 eine glättende Wirkung auf die Speziesverläufe hat. Dies wird von der FASTEST-Simulation ebenfalls gut reproduziert. Für CO ist der Beitrag des Thermodiffusionsterms vergleichsweise klein, auch dies wird aus der FASTEST-Simulation deutlich, wobei hier der Beitrag leicht von der Referenzlösung abweicht.

Mit diesen Ergebnissen kann hinsichtlich des Soret-Effekts von einer korrekten Implementierung ausgegangen werden, sodass diese Funktionalität in nachfolgenden Simulation, wie

in Kapitel 4 dargestellt, genutzt werden kann.

3.3 Chemiereduktion unter Verwendung des FGM-Ansatzes

Die genaue und zuverlässige Vorhersage chemischer Reaktionen mithilfe der Detaillierten Chemie erfordert, wie bereits erwähnt, das Lösen einer Vielzahl von Transportgleichungen. Zudem ist die Berechnung der Quellterme mit einem erheblichen Rechenaufwand verbunden, welcher sich zum einen aus dem steifen Verhalten des Differenzialgleichungssystems und zum anderen durch die komplexe Abhängigkeit des Quellterms von dem vorliegenden chemischen Zustand ergibt. Hinzu kommt, dass abhängig von den betrachteten Zwischenspezies hohe Anforderungen an die räumliche Auflösung gestellt werden. Diese Eigenschaften limitieren die Anwendung der Detaillierten Chemie auf kleine, meist generische Rechengebiete für akademische Zwecke. Dreidimensionale turbulente DNS-Simulation mit Detaillierter Chemie wurden bisher lediglich mit kleinen Mechanismen durchgeführt, welche beispielsweise für Wasserstoff existieren und bei welchen keine Kohlenstoffreaktionen berücksichtigt werden müssen [31–33]. Die Beschreibung technisch relevanter reagierender Strömungen beinhaltet jedoch relativ große, komplexe Geometrien bei hohen Reynolds-Zahlen. Hinzu kommt, dass häufig Methan oder komplexere Brennstoffe verwendet werden, deren Chemiemechanismen mehrere Hundert Reaktionen beinhalten. Damit ist eine Chemiereduktion für die Simulation realer Anwendungen unumgänglich.

Eine Variante der Chemiereduktion stellt die Tabellierte Chemie dar. Sie verwendet die Ergebnisse aus meist eindimensionalen Detaillierten-Chemie-Simulationen zur Erstellung einer Chemietabelle. Diese Tabellierungsprozedur wird einmalig vor der eigentlichen Strömungssimulation durchgeführt, wobei sich diese dann auf den Transport einiger weniger Kontrollvariablen beschränkt, welche für den Tabellenzugriff benötigt werden. Dabei wird die Annahme gemacht, dass die Flammen der detaillierten Rechnungen mit denen der CFD-Simulation übereinstimmen, wenn sich die Flamme über die Kontrollvariablen eindeutig abbilden lässt.

Bei nichtvorgemischten Flammen wird im Allgemeinen der Mischungsgrad als Kontrollvariable verwendet, da sie sich unter der Annahme von gleichen Diffusivitäten, unendlich schneller Chemie und weiterer Annahmen eindeutig beschreiben lässt [13, 84, 114, 116]. Berücksichtigt man, dass sich die Reaktion von Oxidator und Brennstoff in endlichen Zeitskalen abspielt, muss diese ins Verhältnis mit den Zeitskalen der Strömung, also der Streckungsrate, gebracht werden [82, 83]. Diese kann in der Strömungssimulation über die skalare Dissipationsrate des Mischungsgrades berechnet werden, welche dann einen zusätzlichen Tabellenparameter darstellt. Im Kontext von Vormischflammen wird üblicherweise eine Reaktionsfortschrittsvariable für die Beschreibung der Flamme genutzt [29, 73]. Zusammen mit dem Mischungsgrad kann damit stratifizierte Verbrennung beschrieben werden, wobei Mischen und Reaktion voneinander getrennt auftreten können [51, 72]. Bekannte Entwicklungen, die dieses Konzept umsetzen, sind das FPI- und FGM-Konzept. Letzteres wird in dieser Arbeit genutzt, analysiert und schließlich weiterentwickelt.

Nachfolgend wird das FGM-Konzept, wie es am Institut für Energie- und Kraftwerkstechnik von [7, 34, 49, 50, 52, 54, 55, 74–76] entwickelt wurde, dargestellt. Hierbei wird

der chemische Zustand von vorgemischten Methan-Luft-Flammen auf den Mischungsgrad f , die Fortschrittsvariable \mathcal{Y} und die Enthalpie h projiziert und tabelliert. Die Hinzunahme der Enthalpie, welche den letzten Entwicklungsschritt des Konzepts darstellt, erlaubt die Beschreibung von Wärmeverluste an Wänden, welcher einen wesentlichen Aspekt der Flamme-Wand-Interaktion darstellt. Zur Tabellenerzeugung werden homogene vorgemischte Flammen mithilfe des eindimensionalen CHEM1D-Lösers [16] berechnet. Hierzu werden sowohl der GRI3.0- [100] als auch der Smooke-Mechanismus [101] verwendet, wobei jeweils die Annahme $Lewis = 1$ genutzt wird. Zur Simulation stratifizierter Verbrennung deckt die Tabelle den Mischungsgradraum vollständig ab. Dies wird durch die Wiederholung der eindimensionalen Flammenrechnung unter Variation des Mischungsgrades erreicht, wodurch zunächst der gesamte zündfähige Bereich abgedeckt wird. Außerhalb des zündfähigen Bereichs, in welchem es lediglich zur Mischung kommt, wird die Tabelle unter Annahme verschwindender Quellterme extrapoliert. Die Reaktionsfortschrittsvariable wird durch den Massenbruch von CO_2 dargestellt, da sie eine relative geringe Auflösungsanforderung mit sich bringt und eine hinreichende Monotonie aufweist [55], welche für eine eindeutige Abbildung erforderlich ist. Zuletzt wird eine Variation des chemischen Zustands für verschiedene Enthalpielevel erzeugt. Dies wird zum einen durch Vorwärmen des Frischgases und zum anderen mithilfe der brennerstabilisierten Flammenkonfiguration [73] erreicht. Bei Letzterem wird die Enthalpie in einem sehr kleinen Bereich vor der Flamme entzogen, sodass sich über die gesamte Flamme hinweg ein konstantes Enthalpie-niveau einstellt. Um sehr tiefe Enthalpieniveaus abdecken zu können, wird hier ebenfalls extrapoliert. Die Variation des Enthalpielevels erfolgt hierbei für jede einzelne Variation des Mischungsgrades, sodass zusammen mit der Fortschrittsvariablen ein dreidimensionaler Zustandsraum aufgespannt wird.

3.4 Chemiereduktion unter Verwendung des REDIM-Ansatzes

Eine weitere Methode der Chemiereduktion stellt die sogenannte reaction-diffusion manifold (REDIM) dar. Nachfolgend wird ihr zugrunde liegendes Konzept skizziert, wie es am Institut für Technische Thermodynamik (KIT) von der Arbeitsgruppe um Maas erarbeitet wurde. Es stellt eine Weiterentwicklung der intrinsic low-dimensional manifold dar (ILDm), welche von Maas und Pope [61] vorgeschlagen wurde. Maas und Bykov [60] und Bykov und Maas [14] erweiterten den ILDM-Ansatz zum REDIM-Ansatz, bei welchem neben der Reaktionskinetik der Einfluss der Diffusion berücksichtigt wird.

Die REDIM-Methode basiert auf der Annahme, dass schnelle und langsame chemische Prozesse voneinander entkoppelt werden können. Die schnellen Prozesse werden als stationär angenommen, da sie in kurzer Zeit ablaufen. Die langsamen Prozesse hingegen überlappen mit den Zeitskalen des molekularen Transports, weshalb diese unter Berücksichtigung von Diffusion gelöst werden müssen. Die Entkopplung der schnellen von den langsamen Prozessen entspricht einer Projektion des chemischen Zustands, welcher zunächst durch die Gesamtzahl seiner Parameter gegeben ist, auf eine reduzierte Anzahl von Kontrollvariablen, welche im Kontext der REDIM als generalisierte Koordinaten be-

zeichnet werden. Im Unterschied zur FGM-Methode entsprechen diese keiner physikalische Größe, sondern stellen vielmehr einen Hilfsraum dar, in welchem der chemische Zustand entsprechend des transformierten Systems der Erhaltungsgleichungen (Evolutionsgleichungen) [14, 60] gelöst wird. Da der Lösungsraum, welcher durch die generalisierten Koordinaten aufgespannt wird, im Gegensatz zu den eindimensionalen Flammenrechnungen im Rahmen der FGM-Tabellierung mehrdimensional ist, können hierbei auch Diffusionsprozesse quer zu den jeweiligen generalisierten Koordinaten abgebildet werden (vergleiche Kreuzdissipationsrate in Abschnitt 2.1.8). Zur Lösung der Evolutionsgleichung wird diese integriert, wobei die REDIM-Lösung dem stationären Zustand entspricht. Zur Verwendung des Ergebnisses als Chemietabelle muss die erhaltene Lösung schließlich auf physikalischen Kontrollvariablen transformiert werden. Ebenso müssen die Quellterme der generalisierten Koordinaten in Quellterm der Kontrollvariablen umgeformt werden, um sie in der Strömungssimulation verwenden zu können. Ähnlich wie in Abschnitt 2.1.8 besprochen, ist die Transformation des Differenzialgleichungssystems in den Raum der generalisierten Koordinaten mit dem Verlust der Information über physikalische Randbedingungen und damit auch der Flammenstruktur verbunden. Diese müssen bei der Lösung des chemischen Zustands im Raum der generalisierten Koordinaten in Form von Gradienten des chemischen Zustands eingebracht werden. Diese könne ebenfalls durch die Kontrollvariablen parametrisiert vorgegeben werden [106]. Eine grobe Abschätzung der in der Strömungssimulation erwarteten Gradienten führt dabei bereits zu akzeptablen Ergebnissen.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Kopplung der Tabelle mit dem FASTEST-Code hergestellt, wobei hierzu analog zur FGM-Tabelle ein Zugriff über den transportierten CO_2 -Massenbruch sowie die Enthalpie implementiert wurde. Weiterhin wurde für die REDIM-Tabellenerzeugung von der Annahme $\text{Lewis} = 1$ Gebrauch gemacht, um die Vergleichbarkeit mit der FGM-Tabelle und der in Kapitel 5 vorgestellten HOQEGR-Tabelle sicherzustellen.

Kapitel 4

Untersuchung wandnaher Verbrennung

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit der Untersuchung der physikalischen Phänomene im Kontext der Flamme-Wand-Interaktion anhand generischer Konfigurationen. Hierzu werden zunächst die beiden wichtigsten FWI-Szenarien vorgestellt. Es folgt eine kurze Einführung in das Thema Turbulenz und ihren Einfluss auf Flamme-Wand-Interaktionsprozesse. In den letzten Abschnitten dieses Kapitels werden die konkreten FWI-Untersuchungen dargelegt.

Wie in der Einleitung erwähnt, stellt die Flamme-Wand-Interaktion (FWI) einen häufigen Fall in der technischen Verbrennung dar, wobei im Folgenden lediglich vorgemischte Verbrennung betrachtet wird. Bei der FWI kommt die Flamme in Kontakt mit einer meist relativ kalten Wand, wobei sich mehrere Prozesse gleichzeitig abspielen. Zum einen kommt es zu einem Wärmefluss aus dem heißen Verbrennungsgas in die Wand hinein. Dies führt zu einem Absinken der Enthalpie in der Flamme und damit zur Stagnation einiger Elementarreaktionen und letztlich zu einer Verschiebung deren chemischen Zustands. Überwiegt der Enthalpieentzug den Enthalpienachfluss aus dem bereits verbrannten Heißgas, kommt es zum Flammenverlösch, da keine Umsetzung des Brennstoffs mehr möglich ist. Dies kann zum Verbleiben von Brennstoff sowie unverbrannten Kohlenwasserstoffen (unburned hydrocarbons: UHCs) führen. Ist der Wärmefluss in die Wand groß oder hält dieser über eine hinreichend lange Zeit an, so kommt es zur Erwärmung der Wand und damit je nach Wanddicke und Kühlkonzept zu thermischen Spannungen. Diese wiederum können Einfluss auf die Lebensdauer des betrachteten Bauteils haben. Im Folgenden werden zunächst die beiden idealisierten Szenarien des Flammenverlöschs beschrieben. Hiernach schließt sich die numerische Untersuchung dieser Szenarien im Rahmen von ein-, zwei- und dreidimensionalen Simulationen an, zu deren Validierung experimentelle Daten zur Verfügung stehen. Schließlich werden die Ergebnisse hinsichtlich der beobachteten Phänomene analysiert. Ein weiterer Punkt stellt die Bewertung und Analyse der in Kapitel 3 besprochenen Verbrennungsmodelle dar.

4.1 Idealisierte Formen des Flammenverlöschs

Paralleles Flammenverlösch (*Head-on quenching* (HOQ)):

Beim parallelen Flammenverlösch ist die Flammenfront parallel zur Wand orientiert. Ihre Ausbreitungsrichtung ist senkrecht zur Wand, sodass sich zwischen Wand und Flamme Frischgas und hinter der Flamme verbranntes Heißgas befindet (siehe Abbildung 4.1

links). Geht man von einer stoffundurchlässigen Wand aus, so handelt es sich beim parallelen Flammenverlöschn stets um einen transienten Vorgang, an dessen Ende das vollständige Verschwinden des chemischen Umsatzes steht. Wird die Flammenfront als ideal eben angenommen, wie es bei einem laminaren Strömungsfeld der Fall ist, so lässt sich der gesamte Vorgang eindimensional beschreiben.

Senkrechtes Flammenverlöschn (*Sidewall quenching* (SWQ)):

Beim senkrechten Flammenverlöschn steht die Flammenfront senkrecht zur Wand. Ihre Ausbreitungsrichtung ist dabei parallel zur Wand orientiert (siehe Abbildung 4.1 rechts). Das Flammenfrontende, welches in Kontakt mit der Wand steht, befindet sich in einem andauernden Zustands des Flammenverlöschens, sofern von einer laminaren Strömung ausgegangen wird. Während die Enthalpiegradienten im Wesentlichen normal zur Wand stehen, zeigen die Gradienten der Spezieskonzentrationen parallel zur Wand. Damit handelt es sich beim senkrechten Flammenverlöschn, selbst für laminare Strömungen, um ein zweidimensionales Problem. Aufgrund der unvermeidlichen Strömungsgrenzschicht an der Wand und der vergleichsweise geringen thermischen Expansion durch die Flamme in unmittelbarer Wandnähe ist eine exakt senkrechte Orientierung von Flamme und Wand schwer zu realisieren. Häufig, wie auch in dieser Arbeit, wird stattdessen ein Winkel kleiner 90° akzeptiert. Die Stationarität und der zweidimensionale Charakter des Problems bleiben davon unberührt.

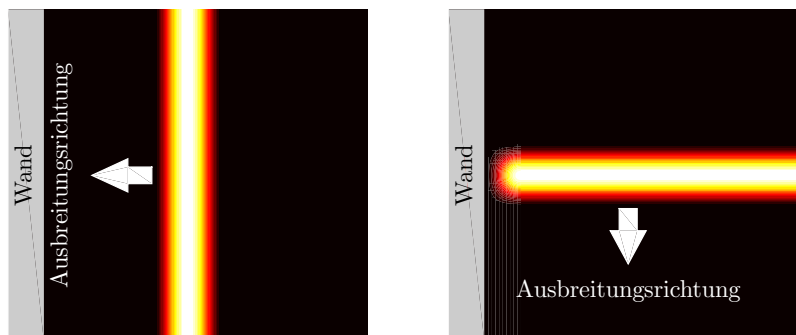


Abbildung 4.1: Ideale Formen des Flammenverlöschens: Paralleles Flammenverlöschn *Head-on quenching* (links), senkrechtes Flammenverlöschn *Sidewall quenching* (rechts).

4.2 Turbulenz

Strömungen lassen sich grundsätzlich in turbulente und laminare Strömungen unterscheiden. Beide Arten lassen sich durch das in Abschnitt 2.1 eingeführte Differenzialgleichungssystem beschreiben, weisen jedoch ein völlig unterschiedliches Verhalten auf. Ein fundamentaler Unterschied zwischen ihnen besteht in ihrer Reaktion auf Störungen. Während bei laminaren Strömungen Störungen gedämpft werden und das Strömungsfeld regelmäßig bleibt, kommt es bei turbulenten Strömungen zu einer Anfachung der Störung. Es entsteht ein chaotisches Geschwindigkeitsfeld, welches grundsätzlich instationär, dreidimensional und quasizufällig ist.

Ob eine Strömung laminar oder turbulent ist, hängt von dem Verhältnis der herrschen-

den Trägheitskräfte zu den viskosen (dämpfenden) Kräften ab. Das Verhältnis wird dabei mithilfe der Reynolds-Zahl quantifiziert [91, 92]

$$Re = \frac{\mathcal{U}\mathcal{L}\rho}{\mu} = \frac{\mathcal{U}\mathcal{L}}{\nu}. \quad (4.1)$$

Hierbei bezeichnen \mathcal{U} die charakteristische Geschwindigkeit und \mathcal{L} die charakteristische Längenskala des Problems. Unterhalb eines bestimmten Wertes der Reynolds-Zahl dominieren die viskosen Kräfte und die Strömung ist laminar. Für Reynolds-Zahlen darüber ist die Strömung turbulent, da Störungen nicht gedämpft werden können. Dazwischen gibt es einen Transitionsbereich, der in beide Richtungen durchlaufen werden kann.

In den meisten technischen Anwendungen sind turbulente Strömungen zu finden, die durch typische Baugrößen und die auftretenden Geschwindigkeiten bedingt ist. Zudem ist ein turbulentes Strömungsfeld bei vielen technischen Verbrennungsszenarien wünschenswert, da es zum einen das Mischen von Brennstoff und Oxidator beschleunigt und zum andern im Rahmen der Flammenverwinkelung zu großen reaktiven Oberflächen und damit zu einer hohen Brennstoffumsetzungsichte führt.

Zur Behandlung der Turbulenz existieren drei wesentliche Methoden, welche an dieser Stelle skizziert werden sollen. Dies ist zum einen die Direkte Numerische Simulation (DNS). Hierbei wird das Differenzialgleichungssystem entsprechend Abschnitt 2.1 ohne weitere Modelle gelöst. Abhängig von den kleinsten turbulenten Längenskalen sind hierfür meist feine numerische Gitter nötig, um alle relevanten Strukturen auflösen zu können. Ein weiterer Ansatz stellt die Reynolds-Averaged-Navier-Stokes-Gleichung (RANS) dar. Im Rahmen dieses Ansatzes wird lediglich ein zeitlich gemitteltes Strömungsfeld berechnet. Ein dritter Ansatz der numerischen Behandlung der Turbulenz ist mit der Grobstruktursimulation (large eddy simulation (LES)) gegeben. Hierbei werden große turbulente Strukturen aufgelöst, wohingegen die kleinen turbulenten Skalen modelliert werden.

In dieser Arbeit werden keine turbulenten Konfigurationen betrachtet. Die LES sei jedoch hier hervorgehoben, da sie zusammen mit der Tabellierten Chemie eine sinnvolle Kombination darstellt. So tragen beide Ansätze jeweils zu einer Reduktion der erforderlichen räumlichen Auflösung des numerischen Gitters bei, sodass die Berechnung realer turbulenter reagierender Strömungen mit einem überschaubaren Rechenaufwand ermöglicht wird. An dieser Stelle sei weiterhin das artificially thickened flame model (ATF) erwähnt. Es ermöglicht die Auflösung von Flammen auf groben Gittern, indem die Flamme künstlich verdickt wird. Die laminare Flammengeschwindigkeit bleibt dabei erhalten. Jedoch kommt es beim Aufdicken der Flamme zu einer Unterschätzung der Flammenverwinkelung durch turbulente Strukturen. Um der daraus resultierenden Unterschätzung der Flammenoberfläche sowie dem damit verbundenen chemischen Umsatz zu kompensieren, wird eine Effizienz-Funktion genutzt. Das ATF-Modell wird üblicherweise im Kontext der Reduzierten Chemie genutzt. Eine Anwendung im Kontext der Detaillierten Chemie ist grundsätzlich möglich, aber zumeist nicht sinnvoll, da die hohe Vorhersagegenauigkeit der Detaillierten Chemie durch die Fehler des ATF-Modells bzw. der Effizienz-Funktion zunichte gemacht würden.

4.2.1 Einfluss der Turbulenz auf die Flamme-Wand-Interaktion

Im Rahmen der wandnahen Verbrennung wirkt sich Turbulenz auch auf das Flammenverlöschn aus. Wirbel verändern beispielsweise den Winkel zwischen Flamme und Wand beim SWQ-Szenario. Wirbel können die Flamme von der Wand wegziehen und wieder dagegendrücken. Gemäß Heinrich et al. [41] kommt es beim turbulenten SWQ häufig zu HOQ-Ereignissen. Dies führt zu verschieden stark ausgeprägten Enthalpiegradienten und damit zu einer Variation der Wärmeflüsse. Diese wiederum führen zu einer Variation der chemischen Zustände.

Um den Einfluss der Turbulenz auf die Reaktionskinetik abzuschätzen, werden nachfolgend einige Überlegungen hinsichtlich der Zeitskalen der Chemie auf der einen Seite und der Turbulenz auf der anderen Seite gemacht. Zur Ermittlung der chemischen Zeitskalen wird eine eindimensionale adiabate stöchiometrische Flammensimulation auf Basis der Detaillierten Chemie betrachtet. Hierzu wird zunächst vor der Flamme ein fiktives Partikel initiiert, welches der Strömung perfekt folgt und die Flamme durchquert. Dabei wird der chemische Quellterm $\dot{\omega}_k$ der Spezies k entlang der Partikeltrajektorie $x_p(t)$ entsprechend Gleichung 4.3 integriert, sodass sich der zeitliche Verlauf des akkumulierten Quellterms $Q(t)$ ergibt

$$x_p(t) = \int_{t_0}^t u(\tau) d\tau + x_0, \quad (4.2)$$

$$Q_k(t) = \int_{t_0}^t \dot{\omega}_k(x_p(\tau)) d\tau. \quad (4.3)$$

Abbildung 4.2 zeigt den akkumulierten Quellterm von CO (oben) und CO₂ (unten) entlang der Zeit. Hierbei wurden die Verläufe mithilfe ihres Maximalwertes normiert. Betrachtet

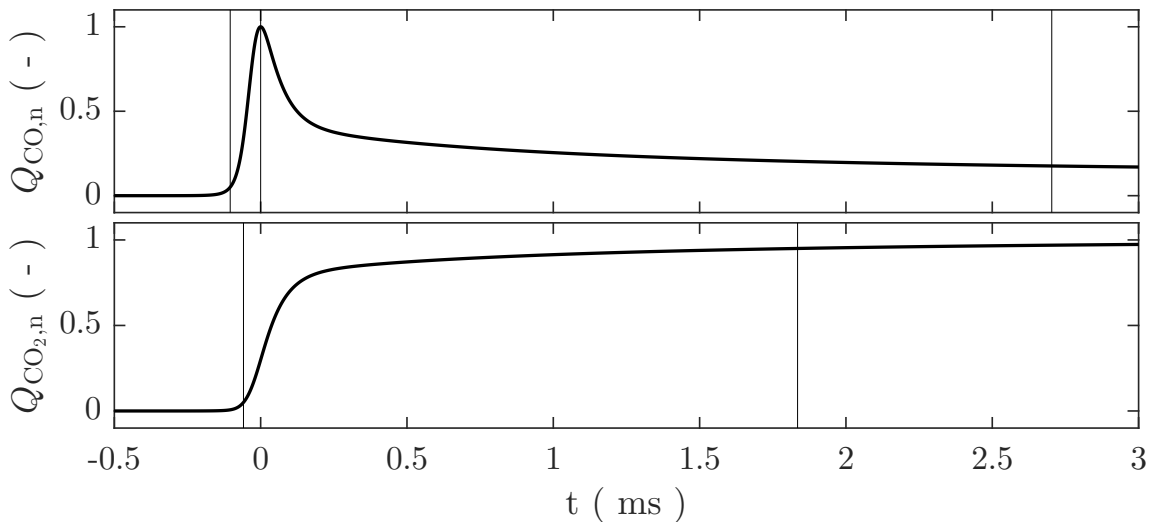


Abbildung 4.2: Zeitliches Integral des Quellterms von CO (oben) und CO₂ (unten) entsprechend Gleichung 4.3 am Ort eines fiktiven Partikels, das sich durch eine adiabate Flamme bewegt.

man zunächst den Verlauf des akkumulierten CO₂-Quellterms, so stellt man fest, dass

90 % des CO_2 -Anstiegs (Anstieg von 5 % auf 95 % des Maximalwertes) in etwa 1,9 ms erreicht wird. Mithilfe einer Abschätzung der chemischen Zeitskala auf Basis der Flammendicke und der Flammengeschwindigkeit erhält man einen ähnlichen Wert ($\delta_F/s_l \approx 0,5 \text{ mm}/30 \frac{\text{cm}}{\text{s}} = 1,667 \text{ ms}$).

Der Verlauf des akkumulierten Quellterms von CO lässt sich in einen Produktions- und einen Oxidationsabschnitt unterteilen [46]. Für diese Abschnitte lassen sich entsprechend der vertikalen Linien in Abbildung 4.2 eine Produktionszeit von etwa 0,1 ms und eine Oxidationszeit von etwa 2,7 ms bestimmen.

Eine Abschätzung typischer turbulenter Zeitskalen wird anhand einer Simulation des SWQ-Brenners, welche von Heinrich et al. [40] durchgeführt wurde, vorgenommen. Der Brenner wird in Abschnitt 4.4.1 detaillierter erläutert werden. Beim SWQ-Brenner, bei

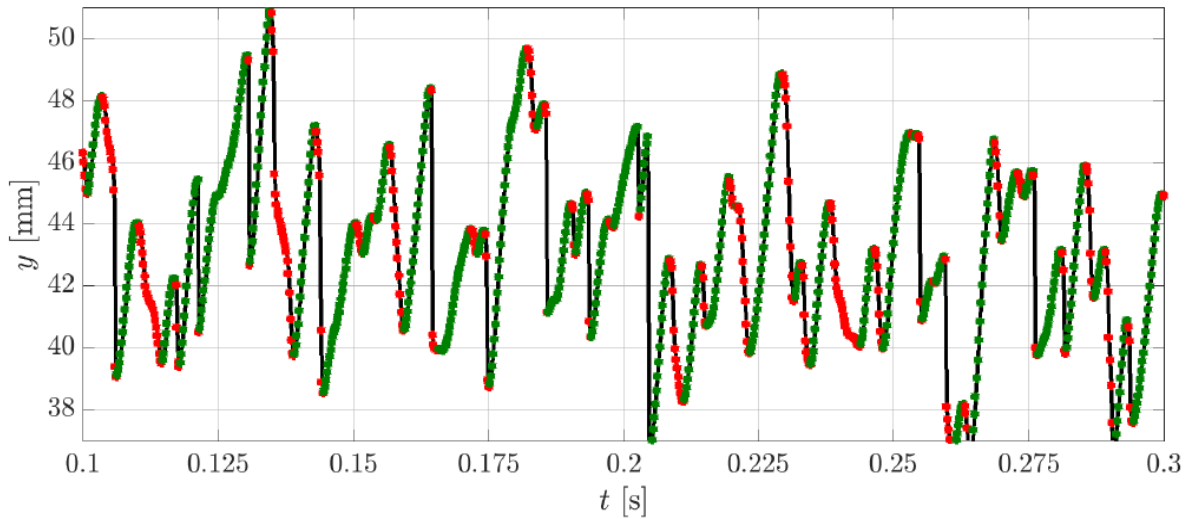


Abbildung 4.3: Wandparallele Position des Flamme-Wand-Kontaktpunktes beim turbulenten SWQ-Brenner. Abbildung entnommen aus [40]. Stromaufbewegungen sind in Rot und Stromabbewegungen in Grün gekennzeichnet.

welchem eine Flamme schräg gegen die Wand brennt, führt die Turbulenz zu einer Fluktuation des Flamme-Wand-Kontaktpunktes, welche in Abbildung 4.3 anhand seiner wandparallelen Position dargestellt ist. Der zeitlich variierende Ort des Kontaktpunktes ist durch Stromauf- und Stromabbewegungen charakterisiert. Die Stromaufbewegungen ($\partial y/\partial t < 0$) sind durch rote Punkte, die Stromabbewegungen ($\partial y/\partial t > 0$) sind durch grüne Punkte gekennzeichnet. Zur Abschätzung der turbulenten Zeitskala werden die Anzahl der Wechsel von Auf- und Abbewegungen pro Zeiteinheit genutzt. Hierbei ergibt sich eine typische Zeit von 200 ms für 43 Richtungswechsel und damit ein Wert von 4,65 ms. Hieraus lässt sich vermuten, dass die CO-Produktion aufgrund ihrer relativ kurzen Zeitskala von der Turbulenz unbeeinflusst bleibt, während die CO-Oxidation eine Zeitskala aufweist, welche in der Größenordnung der turbulenten Zeitskala liegt, und es damit zu einer Interaktion mit der Wirbeln kommen kann.

Die in dieser Arbeit entwickelte Chemietabelle ist sowohl im Hinblick auf eine Variation der räumlichen Enthalpiegradienten als Folge variierten Randbedingungen der FWI-Konfigurationen als auch im Hinblick auf zeitliche Enthalpieänderungen aufgrund von

Turbulenz konzeptioniert. Wie nachfolgend erläutert wird, berücksichtigt die bisher am Institut etablierte FGM-Tabelle zum Zeitpunkt der Tabellenerzeugung weder Enthalpiegradienten noch transiente Enthalpieänderungen, sodass hier Verbesserungen erzielt werden können.

4.3 Analyse der Head-on-quenching-Konfiguration

In diesem Abschnitt werden die numerischen Untersuchungen des HOQ-Szenarios vorgestellt. Dieses Szenario bildet in Verbrennungsmotoren häufig den ersten Schritt der Flamme-Wand-Interaktion, bei welchem sich die Flamme ausgehend von der Zündung durch den Brennraum ausbreitet und schließlich eine Wand erreicht. Im Weiteren breitet sich die Flamme dann entlang der Wand aus, sodass dieser Schritt dem SWQ nahek kommt, welches im nachfolgenden Abschnitt besprochen wird [20]. In beiden Abschnitten steht die Beschreibung und Analyse des thermochemischen Zustands im Vordergrund. Hierbei wird der Fokus auf die Vorhersage von CO als ein wichtiger Schadstoff gelegt, welcher für die meisten Organismen einschließlich des Menschen gesundheitsschädlich ist [19].

Das HOQ-Szenario wurde von Mann [64] und Mann et al. [65] experimentell untersucht. Hierzu wurde ein Brenner entwickelt, welcher eine generische Nachbildung des HOQ-Prozesses ermöglicht und bei welchem verschiedene Aspekte der Flamme-Wand-Interaktion isoliert betrachtet werden können. Vorarbeiten zur numerischen Beschreibung des HOQ-Brenners wurden von Pantangi [78] geleistet, der erste Untersuchungen für den stationären Betriebspunkt des Brenners vorgenommen hat.

4.3.1 Experimenteller Hintergrund

Die in Abschnitt 4.3.3 gezeigten experimentellen Daten wurden mittels verschiedener laser-messtechnischer Verfahren am rotationssymmetrischen HOQ-Brenner gemessen, dessen wesentliche Merkmale im Folgenden dargestellt werden. Wie in Abbildung 4.4 (a) schematisch gezeigt, strömt bei dem Brenner ein zündfähiges Methan-Luft-Gemisch aus einer Düse, sodass sich ein Freistahl ausbildet. Dieser Freistahl ist gegen eine wassergekühlte, rotationssymmetrische, gekrümmte Scheibe gerichtet, sodass sich eine Stagnationsströmung einstellt [64]. Mithilfe einer zweiten Düse, welche die Gemischdüse konzentrisch umschließt, wird das zündfähige Gemisch mit einem Stickstoff-Hüllstrom (Coflow) gegen den Sauerstoff der Umgebungsluft abgeschirmt. Durch die Verwendung einer Morel-Düse (nicht dargestellt) stromauf der Düsen wird näherungsweise ein konstantes Geschwindigkeitsprofil am Düsenaustritt erzeugt, dessen mittlere Geschwindigkeit auf 2,62 m/s geregelt wird. Dies führt zusammen mit dem Düsenaustrittsradius von 15 mm zu einer Abschätzung der Reynolds-Zahl von 5000.

Der HOQ-Brenner lässt sich in verschiedenen Betriebspunkten betreiben. Es wird zum einen hinsichtlich der Strömung zwischen dem laminaren und dem turbulenten Betriebspunkt unterschieden. Während in letzterem Fall ein Lochblech in die Düse eingelegt und damit Turbulenz erzeugt wird, entsteht ohne das Lochblech eine rein laminare Strömung. Weiterhin ist zwischen der stationären und der instationären Betriebsweise zu unterscheiden. Diese Unterscheidung kann anhand der Abbildung 4.4 (b)-(i) verdeutlicht werden, welche zunächst den transienten Verlöschprozess als Abfolge von momentanen Simulati-

onsergebnissen der Flamme zeigt. Das zündfähige Gemisch wird zunächst 5 mm oberhalb der Düsenaustrittsebene mittels eines fokussierten Laserstrahls gezündet. Ausgehend von dem entstehenden Flammenkern (b) bildet sich im Rahmen der Flammenausbreitung ein größer werdender Flammenball (c) - (d) aus, welcher von der Strömung in Richtung Wand konvektiert wird. Dieser erreicht die Wand zunächst mit seiner flach gewordenen, der Wand zugewandten Seite (e), sodass dieser Teil der Flammenoberfläche in einem transienten Prozess erlischt (f). Wie in Abbildung 4.4 (g) dargestellt, bleibt der Wand abgewandte Teil der Flammenoberfläche intakt. Er wird im Weiteren entgegen der Flammenausbreitungsrichtung konvektiv an die Wand herangetragen (h), wo sie sich stabilisiert. Im stationären Zustand (i) befindet sich heißes Abgas zwischen Flamme und Wand. Da die Flamme dennoch einen Enthalpieentzug durch die Wand erfährt, wird dieser Betriebspunkt als stationäres Flammenverlöschn bezeichnet. Wird die Gemischgeschwindigkeit über einen kritischen Wert erhöht, so reißt die Flammenfront in der Nähe der Rotationsachse auf und wird durch die Strömung radial weggetragen.

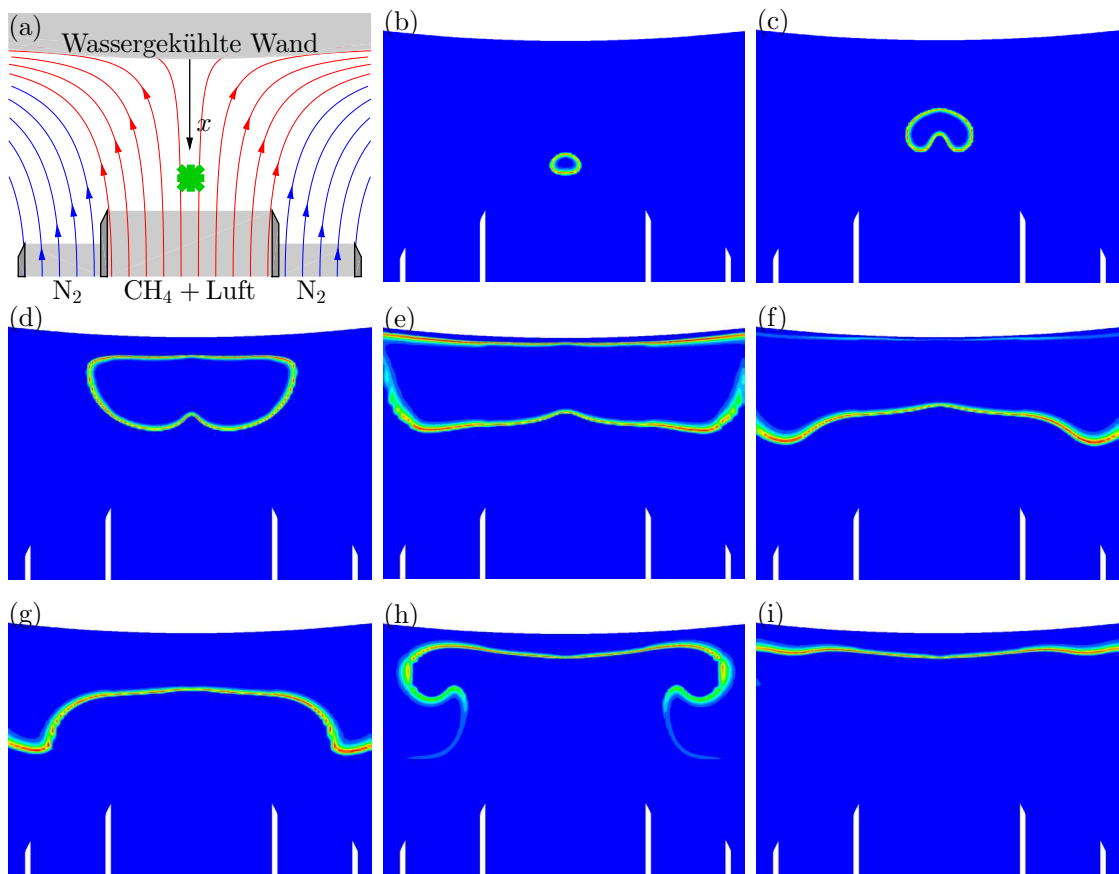


Abbildung 4.4: Das HOQ-Szenario: Schematischer Aufbau (a), transienter Ablauf des HOQs (b)-(h) und stationäres Flammenverlöschn (i).

4.3.2 Numerische Konfigurationen und Simulationsparameter

Während Pantangi [77] sich auf die Untersuchung des stationären Flammenverlöschens unter turbulenten Bedingungen konzentrierte, wird im Rahmen dieser Arbeit der transiente Verlöschvorgang unter laminaren Bedingungen betrachtet. Damit werden die in realen Systemen auftretende Interaktion der Wand auf die Turbulenz der Strömung und auch der Einfluss der Turbulenz auf die Flamme entfernt, sodass eine zielgerichtete Untersuchung der Chemie-Wand-Interaktion durchgeführt werden kann. Dieses Szenario wird unter anderem im Rahmen einer dreidimensionalen FGM-Simulation untersucht, deren Konfiguration sich im Wesentlichen an dem experimentellen Aufbau des Brenners orientiert und im Folgenden erläutert wird.

Abbildung 4.5 (a) zeigt die experimentelle Geometrie der konzentrischen Düsen, welche stromauf bis zum Übergang in die Morel-Düse (nicht gezeigt) numerisch abgebildet werden. Entsprechend Abbildung 4.5 (b) erstreckt sich das Rechengebiet weiterhin von der Düsenaustrittsfläche bis zur gekrümmten Scheibe, wobei eine maximale radiale Ausdehnung von 90 mm erreicht wird. Das numerische Gitter besteht dabei aus etwa 6.5 Mio. Kontrollvolumen, welche sich auf 132 Blöcke aufteilen. Abbildung 4.5 (c) zeigt den in (b) rot markierten Ausschnitt des Gitters. Nahe der Rotationsachse des Brenners wird eine maximale Gitterweite von $320\text{ }\mu\text{m}$ erreicht, welche die Verwendung des ATF-Ansatzes [55] erfordert. Die Gitterweite reduziert sich zur Wand hin auf $100\text{ }\mu\text{m}$, sodass dort die Flamme voll aufgelöst ist und der Einfluss des ATF-Modells verschwindet. Für alle festen Wände, entsprechend Abbildung 4.5 (a), wird eine Temperatur von 300 K und Haftbedingung angenommen. An den Einlässen der Gemischdüse werden ein konstantes Geschwindigkeitsprofil von 2,62 m/s und eine homogene stöchiometrische Mischung vorgegeben. Der Hüllstrom wird entgegen des Experiments nicht mit Stickstoff (N_2), sondern einfachheitshalber mit Luft ausgeführt. Diese Abweichung ist zulässig, da die FWI-Zone nicht von Mischvorgängen der beiden Stoffströme, wie in Abbildung 4.5 (d) zu erkennen ist, beeinflusst wird. Die Geschwindigkeit des Hüllstroms beträgt wie im Experiment 0,52 m/s, für den Einlass, welcher sich bis zum maximalen Radius des Gebiets erstreckt, wird eine Geschwindigkeit von 0,3 m/s angenommen. Für die verbleibende Mantelfläche des Rechengebiets bei einem Radius von 90 mm wird die Nullgradient-Auslassrandbedingung verwendet. Das resultierende Geschwindigkeitsfeld der nicht reagierenden Strömung ist in Abbildung 4.5 (e) dargestellt.

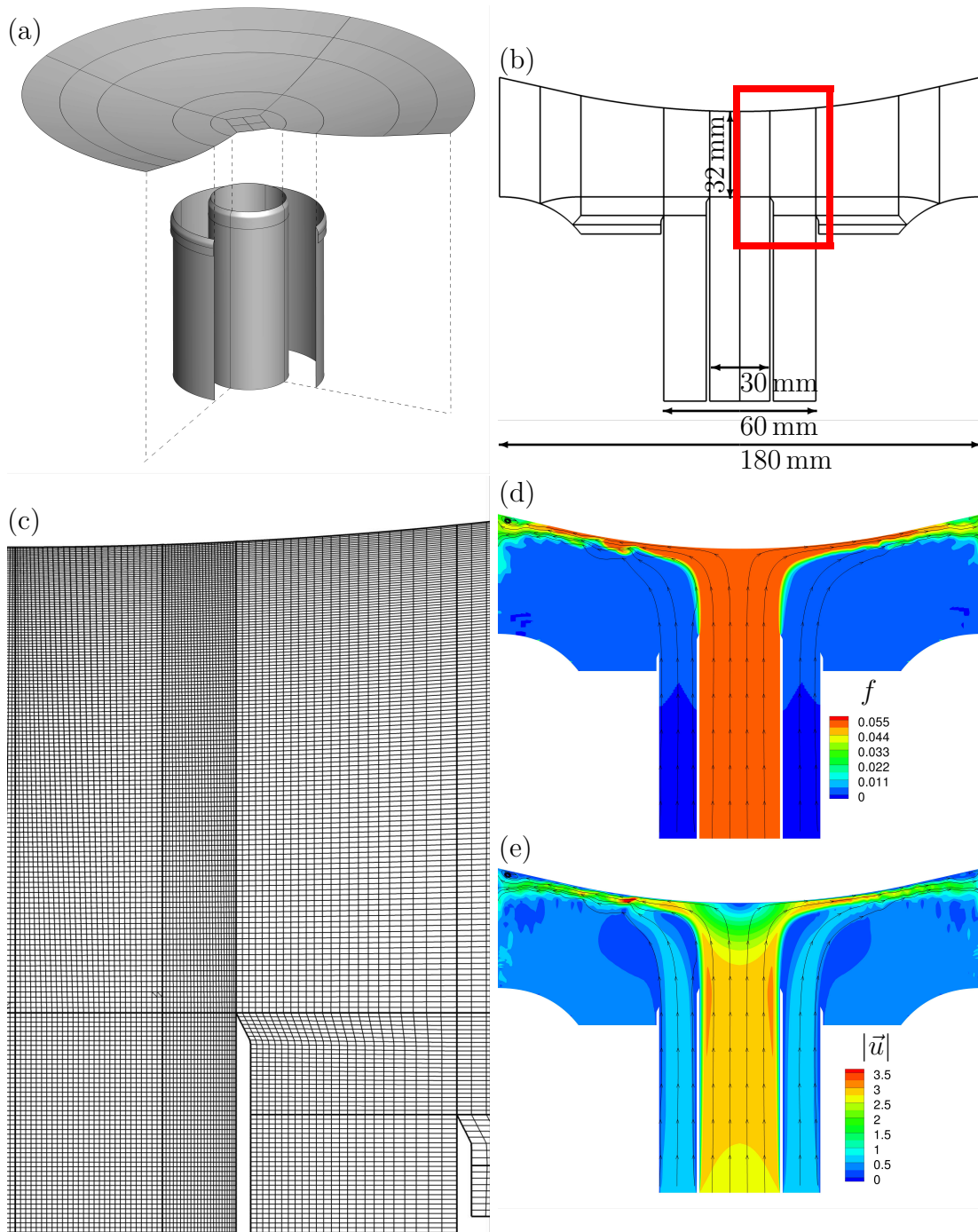


Abbildung 4.5: Numerische Abbildung des HOQ-Brenners: Geometrie der Düsen und der wassergekühlten Wand (a), Darstellung der Blockstruktur des Gitters (b), Darstellung der Wandverfeinerung (c), das Mischungsgradfeld (d) und das Feld der Geschwindigkeitsmagnitude für den nicht reagierenden Fall.

Zur Initiierung des Flammenkerns wird ein kugelförmiges Gebiet als heißes Abgas definiert. Durch Diffusion bildet sich nach kurzer Zeit eine physikalische Flamme aus. Zur Untersuchung des thermochemischen Zustands während des HOQ-Prozesses werden weiterhin ein- und zweidimensionale Konfigurationen genutzt. Die nachfolgenden Vergleiche zeigen, dass diese erheblichen Vereinfachungen der Konfiguration einen nur geringfügigen Einfluss auf die Ergebnisse haben. Die zweidimensionale Konfiguration, welche zur Hochachse symmetrisch ist, wird in Abbildung 4.6 (a)-(c) veranschaulicht. Hierbei wird lediglich die rechte Hälfte des Rechengebiets dargestellt. Das Rechengebiet misst insgesamt

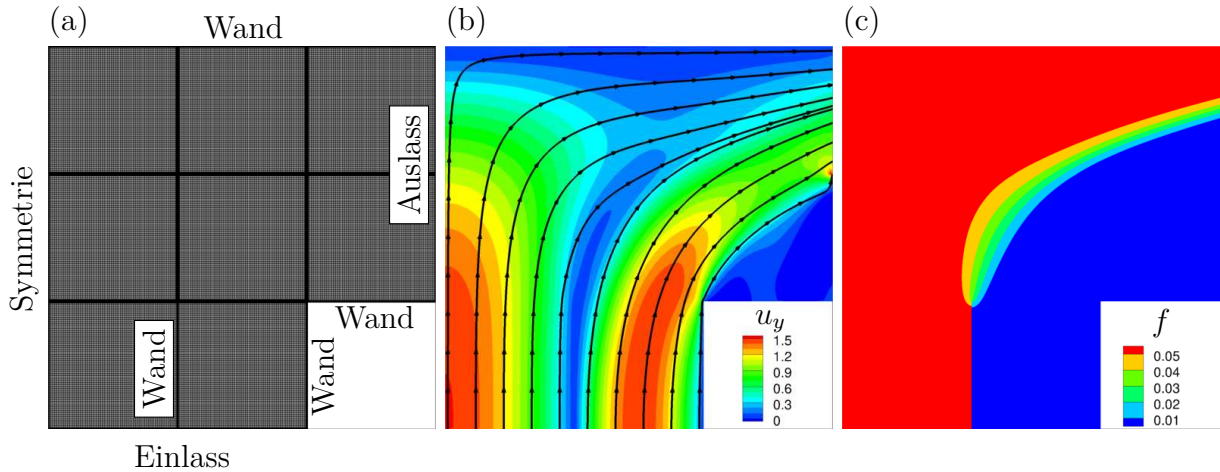


Abbildung 4.6: Zweidimensionale HOQ-Konfiguration mit 80 000 CV auf 8 Blöcken. (a) Numerisches Gitter, (b) wandnormale Geschwindigkeit und (c) Mischungsgrad.

15 x 15 mm und ist entsprechend (a) in 8 Blöcke je 10 000 Kontrollvolumen äquidistant aufgeteilt. Die Wand, an welcher die Flamme verlischt, begrenzt das Gebiet nach oben. Der Einlass teilt sich in einen zentralen Gemischstrom unter stöchiometrischen Bedingungen und einen Luft-Hüllstrom auf. Dies wird in Abbildung 4.6 (c) anhand des Mischungsgrades f verdeutlicht. Die Einlassströme werden auf einer Länge von 5 mm durch eine Wand voneinander getrennt, bevor ein Mischen stattfinden kann. Wie in (c) zu sehen ist, findet oberhalb der Wand ein Mischungsprozess statt, welcher sich bis zum seitlichen Auslass erstreckt. Beide Einlässe werden mit einer parabelförmigen Geschwindigkeitsverteilung mit einem Maximum von 1,5 m/s angenommen. Das resultierende Geschwindigkeitsfeld ist in (b) anhand der wandnormalen Geschwindigkeitskomponente u_y dargestellt. Für alle Wände werden eine Temperatur von 300 K und die Haftbedingung angenommen. Die Temperatur der Einlassströme ist ebenfalls 300 K.

Im Rahmen der FGM-Simulationen wird der Flammenkern analog zur dreidimensionalen Konfiguration durch das Definieren von heißem Abgas in einem kleinen Gebiet auf der Symmetrielinie erzeugt. Die geringe Anzahl der Kontrollvolumen, die für die zweidimensionale Konfiguration notwendig ist, ermöglicht des Weiteren die Verwendung der Detaillierten Chemie zur Beschreibung der Verbrennung. Hierbei wird zur Initiierung des Flammenkerns eine eindimensionale frei propagierende Flamme, welche mit CHEM1D erhalten wurde, um einen Punkt rotiert und auf das numerische Gitter der Konfiguration interpoliert.

Bei den nachfolgend gezeigten eindimensionalen Simulationen ist das Rechengebiet von einer Wand mit 300 K und einem Auslass begrenzt. Die Initialisierung der Flamme geschieht

über Interpolation einer frei propagierenden Flamme. Die eindimensionalen Simulationen werden auf äquidistanten Gittern bei verschiedenen Auflösungen durchgeführt.

4.3.3 Ergebnisse

Zur Bewertung der Simulationsergebnisse stehen simultane Messungen der CO-Konzentration und der Temperatur von Mann et al. [65] zur Verfügung. Es handelt sich dabei um Punktmessungen mittels CARS [22] für die Temperaturmessung und CO-LIF [98] für die Konzentrationsmessung, wobei an verschiedenen Abständen zur Wand entlang der Rotationsachse gemessen wurde.

Zur Veranschaulichung des Verlöschprozesses ist in Abbildung 4.7 das Ergebnis einer eindimensionalen Detaillierten-Chemie-Simulation dargestellt. Hierzu wurden die Profile der

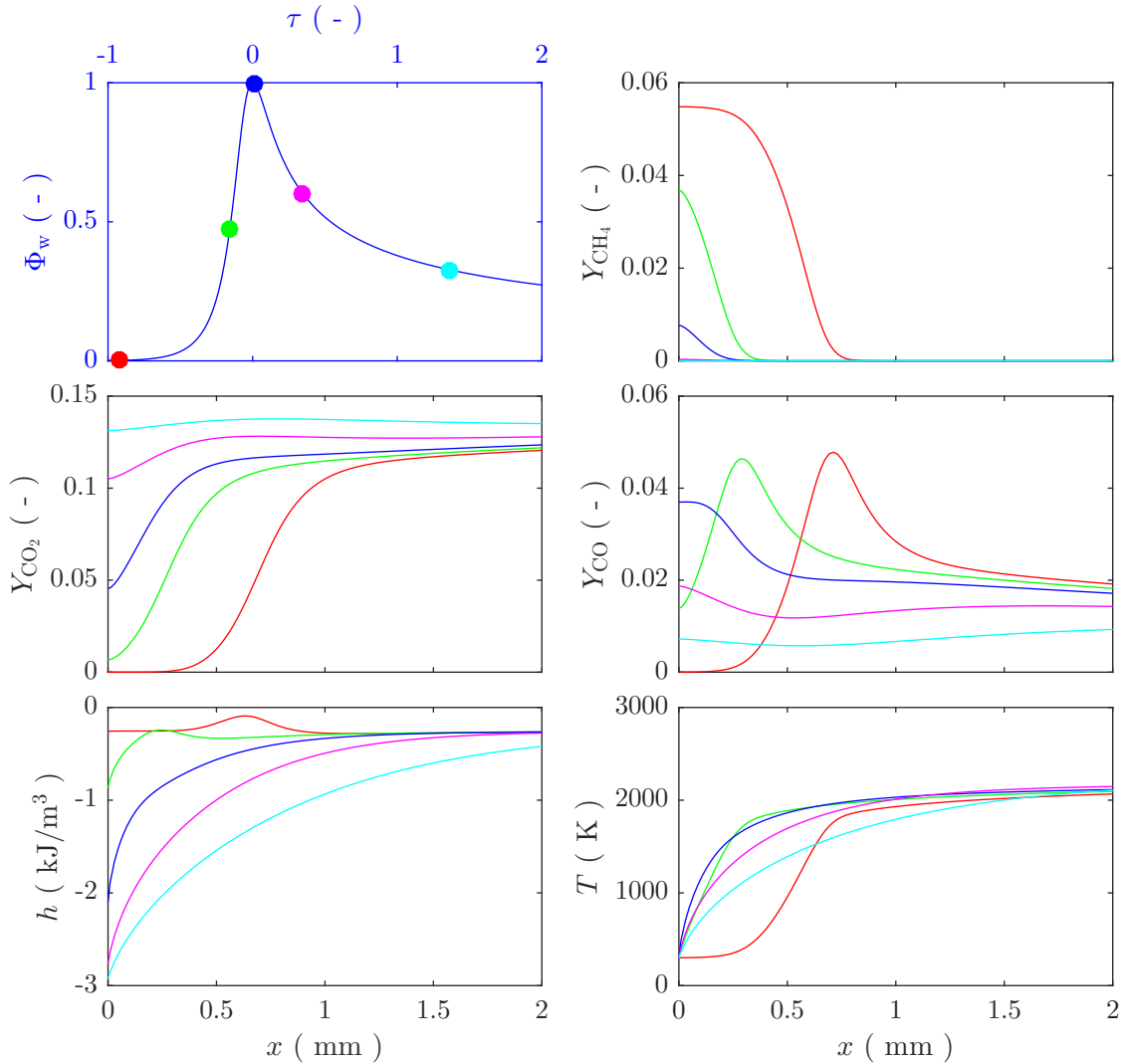


Abbildung 4.7: HOQ: Wandwärmefluss entlang der normierten Zeit (oben links) und Profile verschiedener Spezieskonzentrationen entsprechend der im Wandwärmeflussverlauf farblich markierten Zeitpunkte.

Spezies CH_4 , CO_2 und CO sowie das Profil der Enthalpie und der Temperatur zu fünf Zeitpunkten über dem Wandabstand aufgetragen. Die Zeitpunkte verteilen sich entsprechend des ebenfalls in der Abbildung gezeigten normierten Wandwärmeflusses Φ_w über den gesamten Verlöschprozess. Der Wandwärmefluss berechnet sich hierbei mit

$$\Phi_{w,n} = \frac{\Phi_w}{\max_x(\Phi_w)} \quad \text{mit} \quad \Phi_w = \left(-\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right)_{x=0}, \quad (4.4)$$

wobei zur Normierung der Zeitachse die Flammenzeit t_F genutzt wird

$$\tau = \frac{t}{t_F} \quad \text{mit} \quad t_F = \frac{\rho_F}{s_l} \quad \text{mit} \quad \rho_F = \frac{T_b - T_u}{\max_x \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)}, \quad (4.5)$$

welche auf der Flammendicke ρ_F und der laminaren Flammgeschwindigkeit s_l basiert. Des Weiteren wird der Zeitpunkt $\tau = 0$ durch das Maximum des Wandwärmeflusses definiert.

Messungen stehen für die Wandabstände 100, 200, 300, 500, 900 und 1700 μm zur Verfügung, wobei am wandfernsten Messpunkt kein Einfluss der Wand mehr besteht. Im Folgenden beschränken sich die Ergebnisse auf einen Wandabstand von 200 μm , wo ein deutlicher Wandeinfluss vorhanden ist. In Abbildung 4.8 (links) ist der zeitliche Verlauf der simulierten CO-Konzentration und der Temperatur an diesem Ort dargestellt. Zur

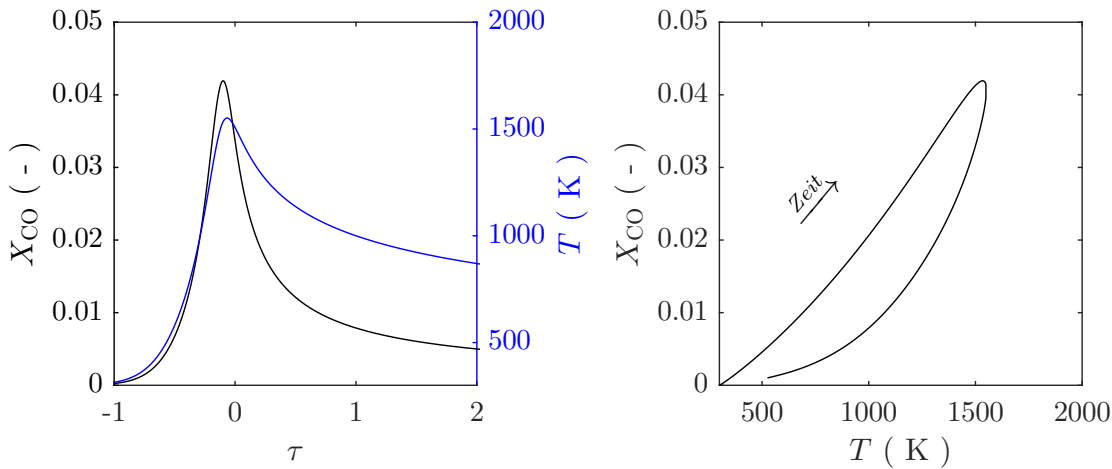


Abbildung 4.8: HOQ: Zeitlicher Verlauf der CO-Konzentration und der Temperatur bei einem Wandabstand von 200 μm (links) und entsprechender Verlauf im Zustandsraum (rechts).

Vermeidung der zeitlichen Synchronisation zwischen experimentellen und numerischen Ergebnissen lassen sich die Verläufe gegeneinander auftragen. Die Darstellungsweise im Zustandsraum führt weiterhin zu einer Streckung des kurzen interessanten Zeitintervalls des Verlöschens, da sich darin sowohl die CO-Konzentration als auch die Temperatur sehr schnell ändern und damit jeweils ein großer Bereich im Zustandsraum durchlaufen wird. Die Abbildungen 4.9 (a)-(d) zeigen die experimentellen und numerischen Ergebnisse [65] im Zustandsraum unter Variation zahlreicher Simulationsparameter. Die höchste Vorhersagegenauigkeit hinsichtlich der abzubildenden Chemie-Wand-Interaktion bietet die Simulation unter Verwendung der Detaillierten Chemie. Abbildung 4.9 (a) zeigt entsprechende

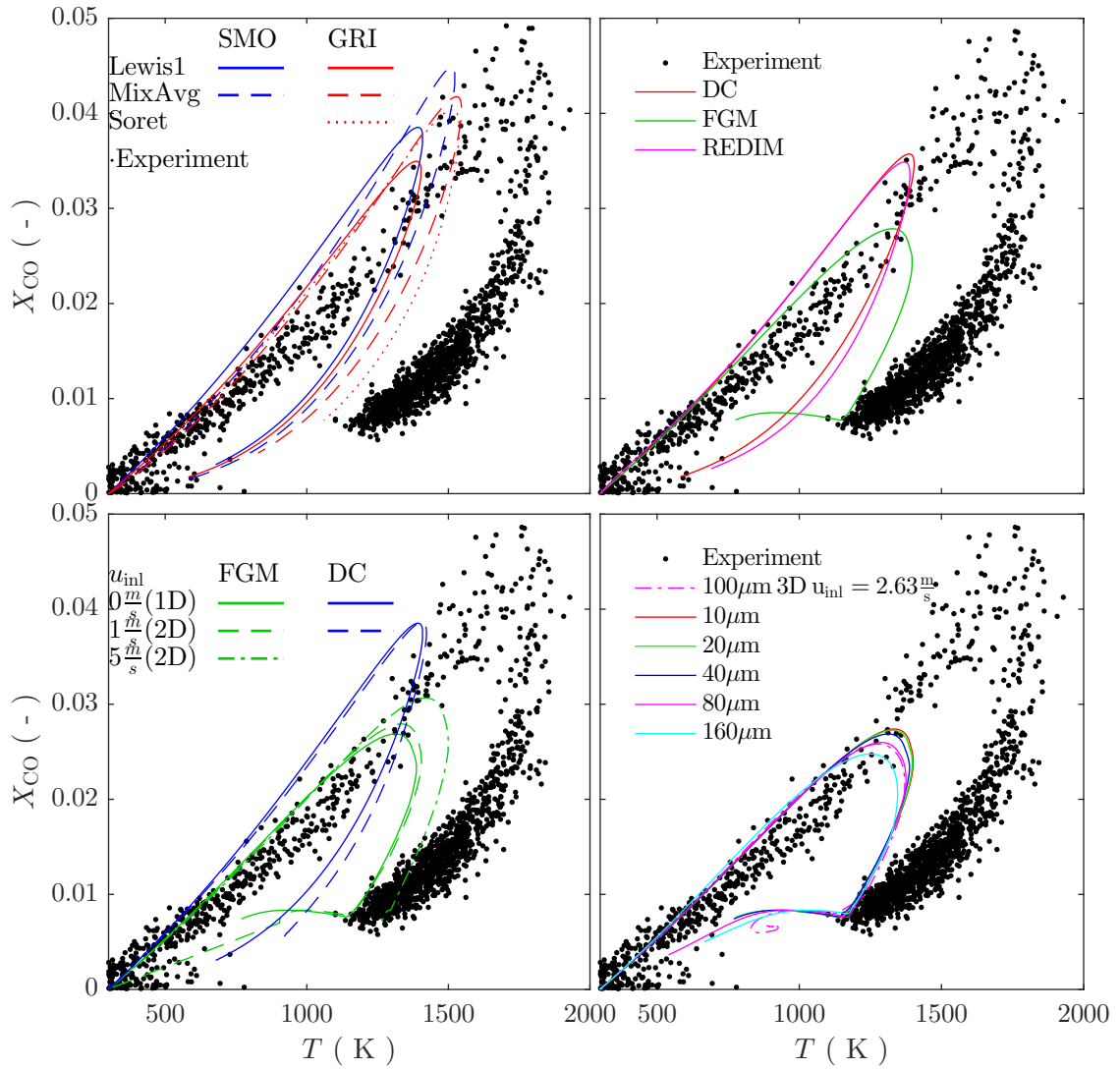


Abbildung 4.9: HOQ: CO-Molenbruch über der Temperatur für verschiedene Simulationansätze und Simulationsparameter.

eindimensionale Ergebnisse unter Verwendung des Smooke- und des GRI-Mechanismus unter Variation der Diffusionsbehandlung bei einer Gitterauflösung von $20\ \mu\text{m}$. Es zeigt sich, dass der Smooke Mechanismus im Vergleich zum GRI-Mechanismus zu deutlich größeren CO-Konzentrationen führt. Die Annahme Lewis = 1 hingegen führt im Vergleich zur Mixture-Average-Diffusionsbehandlung für beide Mechanismen sowohl zu kleineren CO-Konzentrationen als auch zu geringeren Temperaturen. Eine Simulation unter Verwendung des GRI-Mechanismus und unter Berücksichtigung des Soret-Effekts zeigt keinen nennenswerten Einfluss der Thermophorese. Als ein augenfälliges Zwischenfazit ist zu nennen, dass die experimentell gemessenen Temperaturen von keiner der Simulation reproduziert wird.

Abbildung 4.9 (b) vergleicht die Verbrennungsmodelle FGM und REDIM mit den Ergebnissen der Detaillierten Chemie, welche ebenfalls im Rahmen von eindimensionalen

Simulationen erhalten wurden. Hierbei liegt allen Rechnung der GRI-Mechanismus und die Annahme $Lewis = 1$ zugrunde. Für die Erstellung der REDIM-Tabelle wurden die dazu erforderlichen Gradienten der in (a) dargestellten Detaillierten-Chemie-Simulation (GRI/Lewis1) entnommen. Wie bereits erwähnt, kann die Detaillierte Chemie die hohen experimentellen Temperaturen nicht bestätigen, dennoch gibt sie die qualitative Form des zeitlichen Verlaufs im Zustandsraum gut wieder. Während die REDIM das Ergebnis der Detaillierten-Chemie-Rechnung reproduziert, erhält man unter Verwendung des FGM-Ansatzes eine qualitativ abweichende Form des Ergebnisses. Es kommt neben der Unterschätzung der Temperatur zudem zu einer Unterschätzung der CO-Konzentration. Abbildung 4.9 (c) gibt Aufschluss über die Abhängigkeit der Ergebnisse von der Annahme des eindimensionalen Charakters der rotationssymmetrischen Konfiguration sowie die Abhängigkeit von der Einströmgeschwindigkeit des zündfähigen Gemischs. Der Einfluss der Dimensionalität des Problems wird anhand des Vergleichs zwischen eindimensionalen und zweidimensionalen Ergebnissen deutlich, wobei hier die Ergebnisse von der Detaillierten-Chemie-Rechnung (Smooke, Lewis1) und des FGM-Modells genutzt werden. Bei einer Einströmgeschwindigkeit von 1 m/s (Mittelwert der parabelförmigen Verteilung) zeigt sich für beide Verbrennungsansätze nur eine geringe Abweichung zur eindimensionalen Simulation. Eine Simulation mit einer Einströmgeschwindigkeit von 5 m/s, welche weit über der Geschwindigkeit des Experiments von 2,62 m/s liegt, führt zwar zu größeren Temperaturen aber bleibt dennoch weit unter den experimentellen Temperaturwerten. In Abbildung 4.9 (d) ist schließlich das Ergebnis der dreidimensionalen Simulation gezeigt. Da hinsichtlich Geometrie und Randbedingungen keine signifikanten Abweichungen zum Experiment bestehen, ist davon auszugehen, dass die Simulation hinsichtlich der Strömung mit dem Experiment vergleichbar ist. Um den Einfluss der relativ groben Auflösung der dreidimensionalen Simulation bewerten zu können, sind weitere eindimensionale Ergebnisse mit verschiedenen Auflösungen eingezeichnet. Es zeigt sich, dass die Ergebnisse der dreidimensionalen Simulation, welche eine Auflösung von $100\text{ }\mu\text{m}$ aufweist, nahe an dem Ergebnis der eindimensionalen Rechnung bei einer Auflösung von $80\text{ }\mu\text{m}$ liegt. Hieraus kann geschlussfolgert werden, dass die Annahme eines eindimensionalen Problems gerechtfertigt ist und die globale Geometrie der Konfiguration keinen nennenswerten Einfluss auf den thermochemischen Zustand in Wandnähe hat. Zusammenfassend ist zu sagen, dass die experimentell gemessenen Temperaturen im Rahmen dieser Arbeit numerisch nicht reproduziert werden können. Die CO-Konzentration wird mit der Detaillierten-Chemie-Simulation unter Verwendung des Mixture-Averaged-Diffusionsansatzes gut abgebildet, der FGM-Ansatz hingegen unterschätzt die CO-Konzentration. Mögliche Ursache für die Temperaturdiskrepanz ist eine experimentelle Unsicherheit hinsichtlich des Wandabstands.

4.4 Senkrecht Flammenverlöschen (sidewall quenching) [27]

Der Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit liegt auf der Beschreibung und Untersuchung des SWQ-Brenners. In diesem Kapitel wird zunächst der Aufbau des SWQ-Brenners erläutert und experimentelle Arbeiten, welche dieser Arbeit vorangingen, vorgestellt. Es

folgen eine Beschreibung der numerischen Abbildung des Brenners sowie die Einführung und Anwendung der Lagrange'schen Analysemethode zur Untersuchung des thermochemischen Zustands in Wandnähe. Die nachfolgend gezeigten Inhalte wurden teilweise in [27] publiziert.

4.4.1 Der SWQ-Brenner

Der SWQ-Brenner wurde von Jainski [48] entwickelt und dient der Untersuchung der Flamme-Wand-Interaktion unter atmosphärischen Bedingungen. Sein Aufbau ist in Abbildung 4.10 (links) schematisch dargestellt. Ähnlich wie beim HOQ-Brenner wird ein

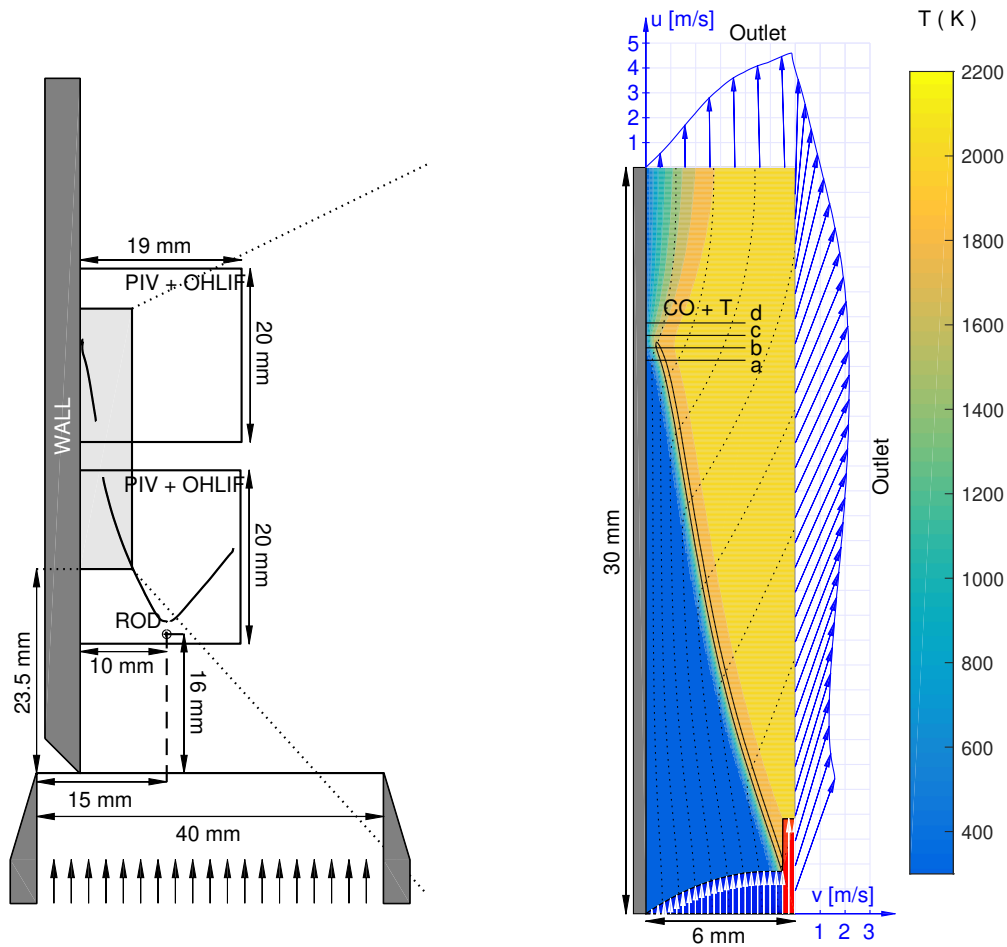


Abbildung 4.10: SWQ-Brenner [48]: Schematischer Aufbau (links) und numerisches Rechengebiet (rechts). Die Positionen (a) -0,550 mm, (b) -0,050 mm, (c) 0,450 mm, (d) 0,950 mm beziehen sich auf den Flammenkontaktpunkt, welcher in Abschnitt 4.4.3 definiert wird.

Methan-Luft-Gemisch durch eine Morel-Düse zur Brennerdüse geleitet, wodurch näherungsweise eine konstante Geschwindigkeitsverteilung in der Düsenaustrittsebene erreicht wird. Die Morel-Düse sowie die Brennerdüse weisen dabei einen quadratischen Querschnitt mit einer Kantenlänge von 40 mm auf. Mithilfe einer zweiten umschließenden Düse (nicht dargestellt), welche ebenfalls mit einem quadratischen Querschnitt ausgeführt ist, wird

ein Stickstoff-Hüllstrom erzeugt, welcher den Gemischstrom von der Umgebungsluft abschirmt. In einem Abstand von 16 mm oberhalb der Düsenaustrittsebene befindet sich ein horizontaler Draht, welcher die Strömung lokal verzögert und somit die Stabilisierung einer Flamme ermöglicht. Die entstehende Flamme bildet entsprechend Abbildung 4.10 zwei Flammenäste, welche in erster Näherung eine zweidimensionale V-Flammengeometrie formen. Einer der Flammenäste brennt dabei an die über dem Düsenaustritt angebrachte wassergekühlte Wand heran, wobei das Flammenende stationär verlischt. Die Wand, deren Temperatur zwischen 300 K und 350 K beträgt, schließt mit der Flamme einen Winkel von etwa 10° ein. Die Strömung in der Düse hat eine Reynolds-Zahl von etwa 5000, wobei wie beim HOQ-Brenner zwischen der turbulenten und der laminaren Betriebsweise unterschieden wird. Hierzu wird im turbulenten Fall ein Lochblech in die Düse eingelegt, sodass die laminare Strömung stromauf des Lochblechs stark gestört wird, sodass eine turbulente Strömung entsteht. Weiterhin wurde der Brenner unter verschiedenen Äquivalenzverhältnissen betrieben, wobei sich nachfolgende Ergebnisse auf den stöchiometrischen laminaren Betriebspunkt beziehen. Hierbei weist der Brenner eine thermische Leistung von etwa 9,3 kW auf.

Im Rahmen seiner Arbeit untersuchte Jainski [48] das Strömungs- und Temperaturfeld sowie die Konzentrationsverteilungen von OH und CO, sodass umfangreiche Referenzdaten für die numerischen Untersuchungen vorhanden sind. Die Verteilung von OH und das Strömungsfeld wurden innerhalb der beiden in Abbildung 4.10 (links) eingezeichneten quadratischen Regionen mittels PIV bzw. OH-LIF vermessen. In einem deutlich kleineren Gebiet, in welchem sich die Flamme-Wand-Interaktion abspielt, wurden weiterhin simultan die Temperatur und die CO-Konzentration mittels CARS bzw. CO-LIF gemessen.

Wie auch bei den Untersuchungen des HOQ-Brenners fiel dabei auf, dass in den relativ kalten Regionen in unmittelbarer Wandnähe signifikant höhere CO-Konzentrationen auftreten, als dies bei gleichen Temperaturen bei einer ungestörten Flamme der Fall ist. Die Experimente konnten jedoch keine Erklärung für diese Beobachtung liefern, sodass der in Abschnitt 4.4.4.3 vorgestellte Analyse eine besondere Bedeutung zukommt.

Erste numerische Untersuchungen des Brenners wurden von [39] vorgenommen, welcher im Rahmen einer FGM-Simulation den laminaren und turbulenten Betriebspunkt des Brenners simulierte. Dabei wurde die gesamte Brennergeometrie einschließlich der Morel-Düse und des Lochblechs simuliert¹, sodass das Strömungsfeld sehr gut wiedergegeben werden konnte. Es zeigte sich, dass es sich bei der Strömung um ein dreidimensionales Problem handelt, da die Flamme eine verdrängende Wirkung auf die Strömung hat und diese zum Ausweichen entlang der Richtung des Drahtes zwingt. Der FGM-Ansatzes konnte dabei sowohl die Flammengeometrie als auch die Flammenstruktur sehr gut reproduzieren. In Wandnähe jedoch zeigten sich Defizite des Modells hinsichtlich der Vorhersage der CO-Konzentration. Die bereits erwähnte Erhöhung des Kohlenmonoxids in unmittelbarer Wandnähe konnte von der FGM-Simulation von [39] nicht reproduziert werden, und damit blieben die Prozesse, die für das experimentelle Ergebnis verantwortlich sind, ungeklärt. Neben der Frage nach der Ursache der CO-Akkumulation ergab sich damit zudem die Frage nach der Fehlersystematik des FGM-Ansatzes, welche in Kapitel 5 beantwortet werden wird.

¹Die Simulation der Morel-Düse und des Lochblechs wurde in einer vorangehenden Simulation durchgeführt und zur Erzeugung von Einlassdaten der FWI-Simulation genutzt.

4.4.2 Die numerische Konfiguration

Wie aus den Ergebnisse von [39] hervorgeht, eignet sich die Verwendung des FGM-Ansatzes nicht für die Untersuchung des thermochemischen Zustands im Rahmen der Flamme-Wand-Interaktion, da sie nicht in der Lage ist, die experimentell gemessenen CO-Konzentrationen zu reproduzieren. Unter Verwendung der Detaillierten Chemie könnte hingegen eine zuverlässige Beschreibung der wandnahen Prozesse erfolgen, jedoch schließt sich ihre Anwendung für die Simulation des gesamten Brenners aufgrund des hohen Rechenaufwands aus. Im Folgenden wird deshalb eine zweidimensionale Konfiguration beschrieben, welche die Verwendung der Detaillierten Chemie ermöglicht, wobei zunächst die Vergleichbarkeit mit der dreidimensionalen Konfiguration gezeigt wird.

Eine wichtige Voraussetzung für die Reduktion des dreidimensionalen Problems ist die Beschränkung der Untersuchung auf den laminaren Betriebspunkt des Brenners. Weiterhin wird davon ausgegangen, dass das Strömungsfeld im interessanten Bereich der Flamme-Wand-Interaktion im Wesentlichen von der Orientierung und dem Abstand der Flamme zur Wand bestimmt ist. Um die Reduktion des Konfiguration zu realisieren, wird das in Abbildung 4.10 (rechts) dargestellte Rechengebiet verwendet, welches eine zweidimensionale Subregion des Brenners darstellt. Die Subregion deckt dabei etwa 80 % des betrachteten Flammenastes ab und ist in Abbildung 4.10 (links) grau hervorgehoben. Entsprechend des experimentellen Aufbaus wird die Wand mit einer Temperatur

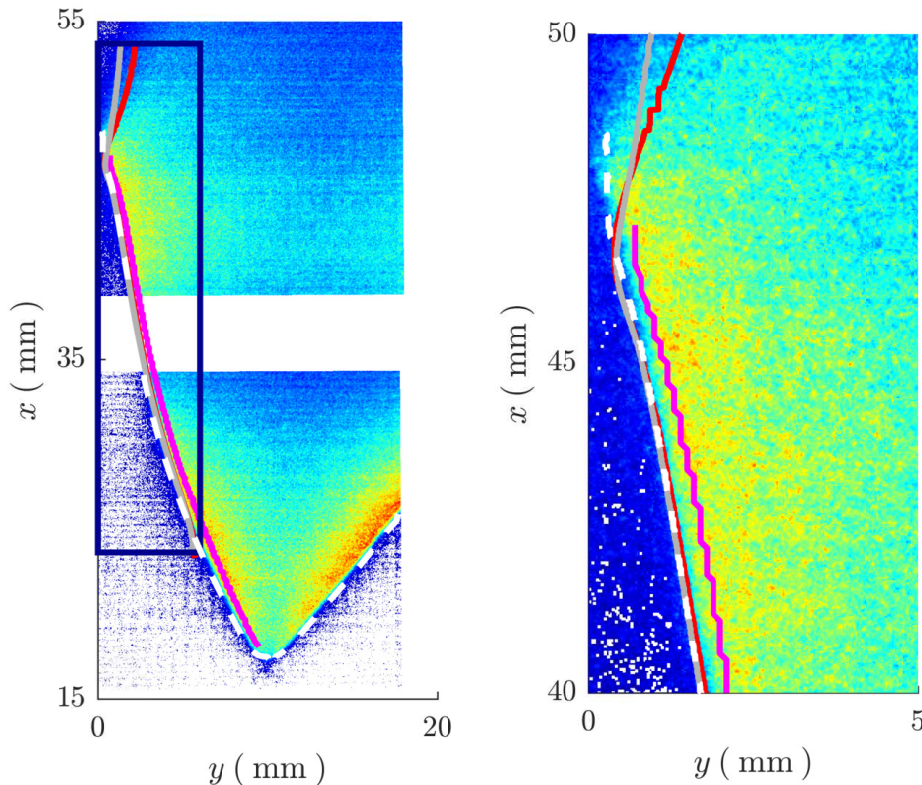


Abbildung 4.11: OH-Verteilung Jainski et al. [48] und Flammenfront (links) und ein vergrößerter Ausschnitt (rechts): Experiment [48] (\square), 3D-FGM [39] (—), 2D-Subregion DC GRI Lewis 1 (—) und 2D-Subregion FGM GRI Lewis 1 (—). Die Subregion ist links in dunkelblau markiert.

von 300 K angenommen, wobei die Haftbedingung verwendet wird. Die Subregion wird zunächst mit dem FGM-Ansatz simuliert, um die Ergebnisse mit denen der dreidimensionalen FGM-Simulation vergleichen zu können. Die bereits erwähnte Verdrängungswirkung der Flamme wird hierbei durch die Verwendung einer angepassten parabolischen Einlassgeschwindigkeitsverteilung imitiert, sodass die sich ergebende Flammengeometrie mit der experimentell gemessenen Flammenfront übereinstimmt. Die gute Kongruenz der Flammenfronten ist in Abbildung 4.11 dargestellt. Die Annahme, dass mit der Übereinstimmung der Flammenfronten auch die Skalarfelder der Simulationen ähnlich sind, wird im Folgenden anhand von wandnormalen Profilen der Temperatur und CO-Konzentration bewertet. Diese sind in Abbildung 4.12 (mittig und rechts) dargestellt. Wie zu sehen ist,

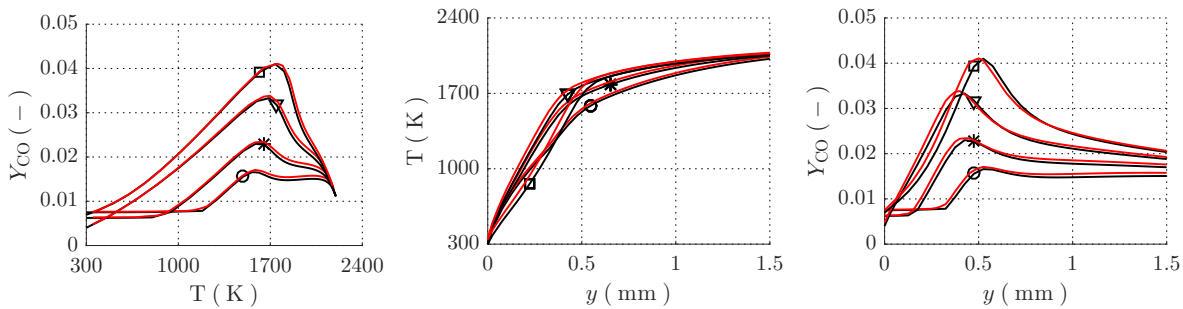


Abbildung 4.12: Vergleich der FGM-Simulation der 2D-Subregion (—) mit der 3D-FGM-Simulation (—) des gesamten Brenners von Heinrich et al. [39]. Die Symbole kennzeichnen die Positionen (a = □), (b = ▽), (c = *), (d = ○) entsprechend Abbildung 4.10.

reproduziert die zweidimensionale Simulation die Ergebnisse von [39], sodass die Verwendung des reduzierten Rechengebiets gerechtfertigt ist, womit die Verwendung der Detaillierten Chemie möglich ist.

Da die Subregion den Draht nicht einschließt, wird die Flamme durch heißes Abgas stabilisiert, welches in einem 0,5 mm breiten Abschnitt des Einlasses in das Rechengebiet injiziert wird (in Abbildung 4.10 (rechts) in rot markiert). Um den Dichteunterschied (und damit den Unterschied hinsichtlich der Massenflüsse) zwischen dem frischen und dem verbrannten Gas teilweise zu kompensieren, wird die Einlassgeschwindigkeit des Abgases in Bezug zum Frischgaseinlass um einen Faktor von 2,244 größer gewählt. Die Simulation wird auf einem kartesischen Gitter mit einer Zellweite von $50 \mu m$ durchgeführt, wodurch sich eine Zellzahl von 72 000 und ein Wert für y^+ von kleiner 0,5 für die gesamte Wand ergibt. Es konnte gezeigt werden, dass eine stöchiometrische Methan-Luft-Flamme, welche bei atmosphärischem Druck etwa eine Flammendicke von 0,5 mm aufweist, unter Verwendung der genannten Chemiemechanismen bei einer Gitterweite von $50 \mu m$ voll aufgelöst wird [68].

Wie erwähnt, werden die Detaillierten-Chemie-Rechnungen entweder unter der Annahme Lewis = 1 oder unter Verwendung der Mixture-Averaged-Diffusionsannahme durchgeführt. Für die Lewis1-Simulationen wird die Bulkgeschwindigkeit des parabolischen Profils zu 1,7 m/s gesetzt und entspricht damit der Geschwindigkeit der zweidimensionalen FGM-Simulation, welche ebenfalls die Annahme Lewis = 1 beinhaltet. Da die laminare Flammengeschwindigkeit im Falle der Mixture-Averaged-Annahme signifikant größer ist, wird die Einlassgeschwindigkeit erhöht, sodass die Flammengeometrie erhalten bleibt.

Tabelle 4.1 listet die Flammengeschwindigkeiten und die entsprechenden Einlassgeschwindigkeiten für die jeweiligen Simulationen.

Tabelle 4.1: Laminare Flammengeschwindigkeiten der stöchiometrischen Methan-Luft-Flamme und Bulk-Einlassgeschwindigkeiten der Subregionsimulation.

	$s_{\text{laminar}}(\text{m/s})$	$u_{\text{bulk}}(\text{m/s})$
FGM Lewis 1	0,279	1,7
GRI Lewis 1	0,281	1,7
SMO Lewis 1	0,290	1,7
GRI MixAvg	0,371	2,244
SMO MixAvg	0,367	2,151

4.4.3 Definition des flammenfesten Koordinatensystems

Obwohl nachfolgend die laminare Betriebsweise des SWQ-Brenners betrachtet wird, traten während des Experiments [48] leichte Fluktuationen des Kontaktpunktes der Flamme mit der Wand in Hauptstromrichtung auf, welche durch akustische Helmholtz-Resonanzen verursacht wurden [46]. Weiterhin zeigen die in Tabelle 4.1 gelisteten Simulationen geringe Abweichungen des Kontaktpunktes, welche durch geringe Abweichungen der Flammengeometrie hervorgerufen werden. Da sich der thermochemische Zustand stark entlang der wandparallelen Koordinate ändert, ist die Einführung eines flammenfesten Koordinatensystems sinnvoll, welches zur Konditionierung der nachfolgend gezeigten Ergebnisse genutzt wird. Abbildung 4.13 zeigt die Region der Flamme-Wand-Interaktion, wobei im Vergleich zu den bisherigen Abbildungen eine um 90° rotierte Darstellung gewählt wurde, sodass sich die Wand hier nun an der Oberseite der Grafik befindet und die Hauptströmung von links nach rechts ausgerichtet ist. Die Farbverteilung gibt die numerisch erhaltene OH-

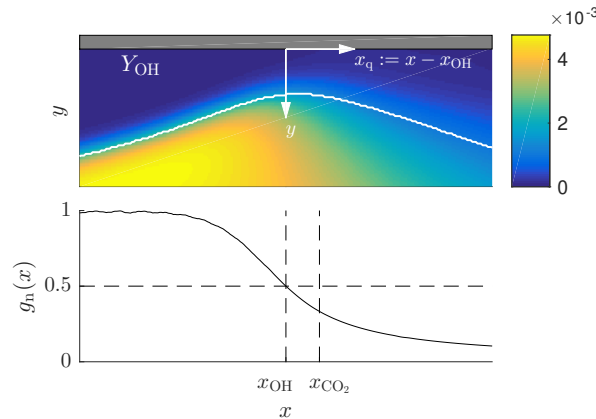


Abbildung 4.13: Oben: OH-Massenbruch in der wandnahen Region mit räumlichem Verlauf des steilsten Gradienten (weiße Linie). Unten: Normierte Hilfsfunktion $g_n(x)$ entsprechend Gleichung 4.6.

Konzentration wieder, welche auch experimentell vermessen wurde. Weiterhin ist das definierende flammenfeste Koordinatensystem eingezeichnet, dessen x_q -Koordinate parallel zur Wand und dessen y -Koordinate normal zur Wand stehen. Die wandparallele

Position des Ursprungs, welcher auf dem Rand des Rechengebiets liegt, wird durch den Flammenkontaktpunkt definiert. Dieser wird abhängig von der Verfügbarkeit der experimentellen und numerischen Daten verschiedenartig definiert, wie nachfolgend erläutert wird. Für die Definition des Flammenkontaktpunktes im Kontext der experimentellen Ergebnisse wird das gemessene OH-Feld herangezogen. Da die FGM-Simulationen nicht in der Lage sind, das OH-Feld korrekt vorherzusagen, wird für die Definition des Kontaktpunktes im Kontext der FGM-Simulationen das CO₂-Feld genutzt, welches eine hohe Genauigkeit aufweist. Die Detaillierten-Chemie-Rechnungen hingegen sind in der Lage, sowohl die OH-Verteilung als auch die CO₂-Verteilung zuverlässig abzubilden, weshalb ihre Ergebnisse zur Verknüpfung der beiden Kontaktpunktdefinitionen des Experiments auf der einen Seite und der FGM-Simulationen auf der anderen Seite genutzt werden. Zur Definition des Kontaktpunktes basierend auf der OH-Verteilung wird zunächst der Gradient des OH-Feldes berechnet. Entsprechend

$$g(x) = \max_{y \in [0,6] \text{ mm}} \left[|\nabla Y_{\text{OH}}(x, y)| \right]_{x=\text{const}} \quad (4.6)$$

wird dann eine Hilfsfunktion $g(x)$ definiert, welche für jede Stelle x entlang der Wand das Maximum der euklidischen Norm des Gradienten entlang des Wandabstands y wiedergibt. Die Hilfsfunktion wird schließlich mit ihrem Maximalwert entlang der x -Koordinate entsprechend

$$g_n(x) = \frac{g(x)}{\max_x [g(x)]} \quad (4.7)$$

normiert und ist in Abbildung 4.13 dargestellt. Der Kontaktpunkt ist schließlich durch die x -Position definiert, an welcher die Hilfsfunktion auf die Hälfte ihres Maximalwerts abgefallen ist. Somit lässt sich die Definition des Kontaktpunktes basierend auf der OH-Verteilung mit

$$x_{\text{OH}} = \{x \mid g_n(x) = 0,5\} \quad (4.8)$$

notieren. Der auf der CO₂-Verteilung basierende Kontaktpunkt wird definiert als die wandparallele Position, bei welcher die CO₂-Konzentration entlang der Wand den halben Wert ihres Maximums erreicht. Abbildung 4.14 zeigt entsprechend die CO₂-Verteilung in der wandnahen Region (oben) und den Verlauf entlang der Wand (unten). Somit lässt sich die Definition des Kontaktpunktes anhand der CO₂-Verteilung mit

$$x_{\text{CO}_2} = \{x \mid Y_{\text{CO}_2}(x, y = 0) = Y_{\text{CO}_2, \text{half}}\} \quad (4.9)$$

formulieren. Zum Vergleich der experimentellen Daten mit den FGM-Ergebnissen wird für letztere ein OH-basierter Kontaktpunkt $x_{\text{OH,FGM}}$ mit

$$x_{\text{OH,FGM}} := x_{\text{CO}_2, \text{FGM}} + \underbrace{x_{\text{OH,DC}} - x_{\text{CO}_2, \text{DC}}}_{0,15 \text{ mm}} \quad (4.10)$$

rekonstruiert, wobei sich die Werte der Detaillierten Chemie auf die Simulation unter Verwendung des GRI-Mechanismus und der Annahme $\text{Lewis} = 1$ beziehen. Damit lassen sich die FGM-Ergebnisse konsistent zu den experimentellen Daten hinsichtlich ihrer wandparallelen Position konditionieren.

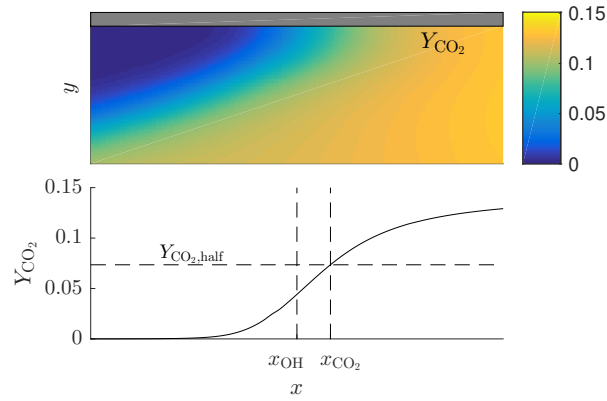


Abbildung 4.14: CO₂-Massenbruch in der wandnahen Region (oben) und entlang der Wand (unten).

4.4.4 Ergebnisse

4.4.4.1 Der thermochemische Zustand in Wandnähe

Im Folgenden werden die Ergebnisse der verschiedenen Detaillierten-Chemie-Rechnungen mit experimentellen Daten und den Ergebnissen der FGM-Simulation verglichen. Auf diesen Vergleichen basierend, wird eine Bewertung der Detaillierten Chemie abgeleitet. Zunächst jedoch wird der chemische Prozess der CO-Bildung und -Oxidation anhand einer stöchiometrischen adiabaten Flamme rekapituliert, wobei hierzu die Lösung einer eindimensionalen Detaillierten-Chemie-Rechnung verwendet wird. Abbildung 4.15 (links) zeigt das Profile einer Flamme anhand des Massenbruchs von Kohlenmonoxid sowie seinen Quellterm. Die Bereiche mit positivem und negativem Quellterm werden als Produktions-

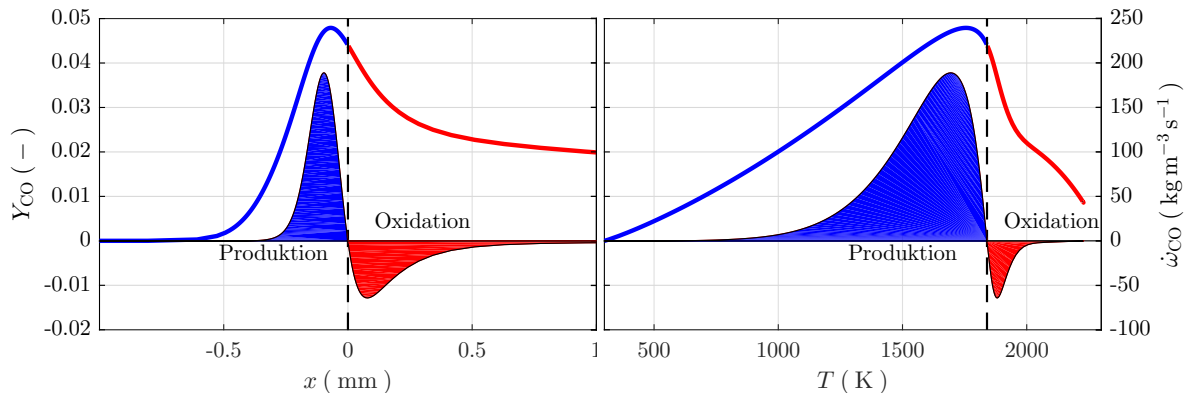


Abbildung 4.15: Adiabate eindimensionale Flammensimulation (CHEM1D): CO-Massenbruch (blaue und rote Linie) und der Quellterm von CO (farbige Flächen) über der Raumkoordinate (links) bzw. über der Temperatur (rechts) für stöchiometrische Bedingungen.

bzw. Oxidationsast bezeichnet. Die Abbildung zeigt, dass der Produktionsast im Wesentlichen von einem CO-Anstieg gekennzeichnet ist, während der Oxidationsast einen monotonen Abfall des Kohlenmonoxids aufweist. Der beginnende Abfall am Ende des Produktionsastes ist der Diffusion geschuldet. Der maximale CO-Massenbruch liegt etwa bei 0,048, der Gleichgewichtswert beträgt etwa 0,009. Abbildung 4.15 (rechts) zeigt die

CO-Verteilung über der Temperatur. Diese Darstellungsweise wird in den nachfolgenden Abschnitten genutzt.

Der in Abbildung 4.15 dargestellte CO-Verlauf konnte auch von Jainski et al. [48] an der Position $x_q = -0,055$ mm, welche am weitesten stromauf des Kontaktpunktes liegt, beobachtet werden. Die Ergebnisse sind in den Abbildungen 4.16 und 4.17 (jeweils die unterste Grafik) dargestellt. Das adiabate Ergebnis ist zur Orientierung ebenfalls in Abbildung 4.17 eingezeichnet. Nahe des Kontaktpunktes bei $x_q = -0,050$ mm zeigen die Ergebnisse von Jainski einen erhöhten CO-Massenbruch in Wandnähe von etwa 0,03. An dieser Position ist das Maximum des CO-Profiles auf 0,038 im Vergleich zur adiabaten Flamme abgeflacht. Der Gleichgewichtswert des Kohlenmonoxids bleibt dabei unverändert auf etwa 0,01. Stromab des Kontaktpunktes ($x_q = 0,950$ mm) konnte Jainski feststellen, dass das CO sowohl nahe der Wand als auch bei dem Wandabstand, bei welchem sich stromauf das Maximum befindet ($y \approx 0,5$ mm), auf seinen Gleichgewichtswert abfällt.

Die Ergebnisse der FGM-Simulation zeigen stromauf des Kontaktpunktes bei $x_q = -0,055$ mm, wo die Flamme näherungsweise adiabat brennt, eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten, sowohl hinsichtlich des CO-Massenbruchs als auch der Temperatur. Wie bereits zuvor erwähnt, ist die FGM jedoch nicht in der Lage, den CO-Massenbruch in der nicht adiabaten Region des Flammenverlöschens ($x_q = -0,050$ mm, $0,450$ mm und $0,950$ mm) abzubilden. Obwohl die FGM-Simulation das Abflachen des Maximalwerts vorhersagt, kann sie den Anstieg des Kohlenmonoxids in unmittelbarer Wandnähe bei der Position $x_q = -0,050$ mm nicht reproduzieren. Die Analyse und Erklärung dieses Defizits ist Bestandteil des nachfolgenden Kapitels. Zunächst ist jedoch das Phänomen des CO-Anstiegs selbst zu klären, womit sich der letzte Abschnitt dieses Kapitels befasst.

Die Ergebnisse der Detaillierten-Chemie-Simulationen zeigen für alle Positionen eine signifikant bessere Übereinstimmung mit den Experimenten als die FGM-Simulation. Wie in den Abbildungen 4.16 und 4.17 zu sehen ist, liegen alle Verläufe innerhalb der experimentellen Streuung, wobei ein moderater Einfluss des verwendeten Mechanismus und der Diffusionsbehandlung festzustellen ist. So lässt sich erkennen, dass sich die Vorhersagegenauigkeit bei Verwendung der vollständigeren Beschreibungsweise verbessert und die Simulation mit dem größeren Mechanismus und der Mixture-Averaged-Diffusionsbehandlung das beste Ergebnis liefert.

Die gute Übereinstimmung der Detaillierten-Chemie-Rechnung erlaubt ihre Verwendung zur Untersuchung des CO-Anstiegs in Wandnähe, welcher weder experimentell noch mit der FGM-Simulation geklärt werden konnte.

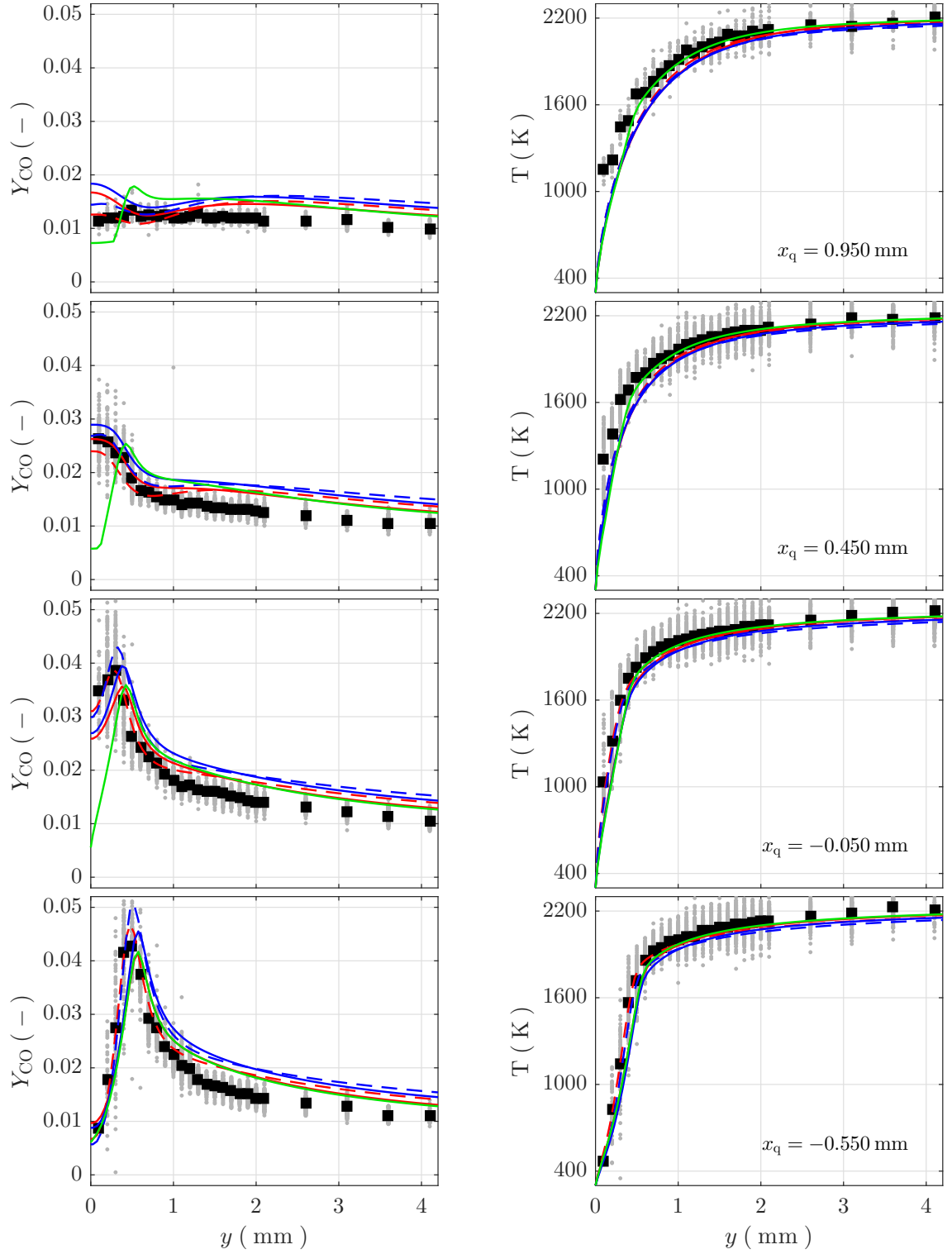


Abbildung 4.16: Temperatur- und CO-Massenbruchprofile: Messdaten [48] (\bullet), Mittelwert der Messdaten (\blacksquare); FGM (—); DC SMO mit Lewis 1 (—), mit MixAvg (---); DC GRI mit Lewis 1 (—), mit MixAvg (---).

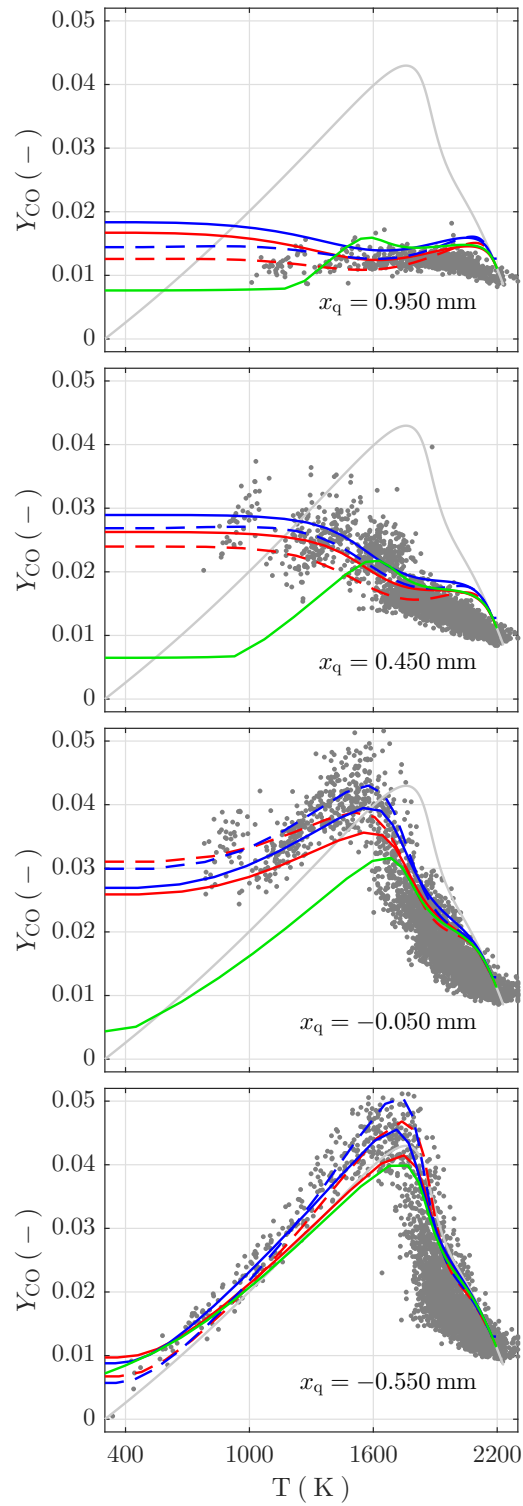


Abbildung 4.17: CO-Massenbruch über der Temperatur: Messdaten [48] (\bullet); adiabates Referenz-Flamelet (CHEM1D) (---); FGM (---); DC SMO mit Lewis 1 (---), mit MixAvg (---); DC GRI mit Lewis 1 (---), mit MixAvg (---).

4.4.4.2 Beschreibung der Lagrange'schen Analyseverfahren anhand eines 1D-Beispiels

Zur Untersuchung des Prozesses, welcher den im vorangehenden Kapitel gezeigten Ergebnissen zugrunde liegt, werden die Ergebnisse der detaillierten-Chemie-Simulation genutzt, um den Einfluss der chemischen Reaktivität und der Diffusion in der Flamme-Wand-Interaktionszone zu bestimmen. Es wird also im Folgenden konkret die Frage nach der Ursache des verhältnismäßig hohen CO-Massenbruchs in dieser Region beantwortet. Als einen vorbereitenden Schritt wird zunächst eine Analyseverfahren eingeführt und anhand eines eindimensionalen Beispiels verdeutlicht, bevor diese dann auf die Daten der SWQ-Simulation angewendet wird. Als ein Zwischenschritt wird das Beispiel zunächst anhand des CO₂-Massenbruchs anstelle des CO-Massenbruchs erläutert, da dies eine klarere Darstellung ermöglicht. Hiernach wird das Beispiel auf CO erweitert, bevor die Methode schließlich auf das SWQ-Szenario übertragen wird.

Betrachtet man die Speziestransportgleichung entsprechend Gleichung 2.5 unter der Mixture-Averaged-Diffusion-Annahme, gegeben durch Gleichung 2.28, so lässt sich diese in der Form

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} = \underbrace{-u_i \frac{\partial Y_k}{\partial x_i}}_{\text{Konvektion: } k} + \underbrace{\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\rho D_k}{W} \frac{\partial (Y_k W)}{\partial x_i} \right)}_{\text{Diffusion: } d} + \underbrace{\frac{\dot{\omega}_k}{\rho}}_{\text{Quellterm: } q} \quad (4.11)$$

notieren. In Abbildung 4.18 (links) sind die mit Konvektion k , Diffusion d und Quellterm q bezeichneten Terme der Gleichung 4.11 für die Spezies CO₂ entlang einer adiabaten eindimensionalen Flamme dargestellt. Während die Vorwärmzone von Diffusion und Konvektion dominiert wird, spielen in der Reaktionszone vor allem der Quellterm und die Konvektion eine Rolle. Um nun den CO₂-Massenbruch in einen reaktiven und einen diffusiven Anteil zu zerlegen, wird die Lagrange'sche Betrachtungsweise verwendet. Durch Integration des diffusiven Terms d und des Quellterms q entlang der Bahnlinie eines fiktiven Partikels, welcher die Flamme durchquert und der Strömung ideal folgt, werden die beiden akkumulierten Größen D und Q entsprechend der Gleichungen

$$\vec{x}_p(t) = \int_{t_0}^t \vec{u} dt + \vec{x}_0, \quad (4.12)$$

$$D(\vec{x}_p(t)) = \int_{t_0}^t d(\vec{x}_p(t)) dt + D_0, \quad (4.13)$$

$$Q(\vec{x}_p(t)) = \int_{t_0}^t q(\vec{x}_p(t)) dt + Q_0 \quad (4.14)$$

erhalten. Da in der Lagrange'schen Betrachtungsweise keine Konvektion auftritt, kann die Konsistenz der Größen mit

$$Y = Q + D \quad (4.15)$$

überprüft werden. Die beiden Größen D und Q sowie deren Summe und der Gesamtmassenbruch Y_{CO_2} sind in Abbildung 4.18 (rechts) dargestellt, wobei zu sehen ist, dass Gleichung 4.15 erfüllt wird. Abbildung 4.19 zeigt die entsprechenden Verläufe für Kohlenmonoxid.

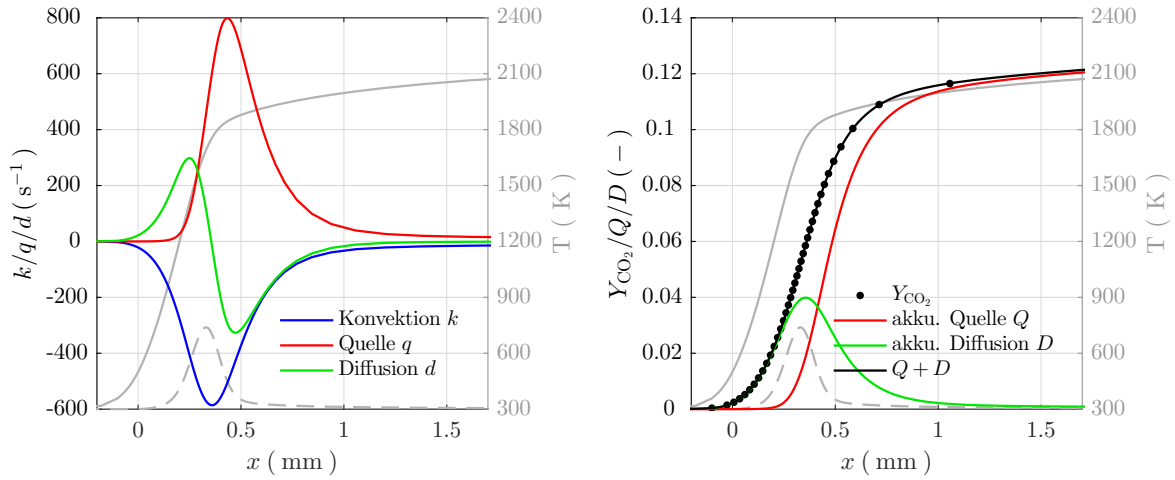


Abbildung 4.18: Links: Quellterm q , Diffusionsterm d und Konvektionsterm k für CO_2 entsprechend Gleichung 4.11. Rechts: Integral des Quellterms Q , des Diffusionsterms D entsprechend den Gleichungen 4.14 und 4.13 sowie deren Summe und der Massenbruch von CO_2 . Zur Orientierung ist die Temperatur (grau) und die qualitative Wärmefreisetzungsrage (grau gestrichelt) eingezeichnet.

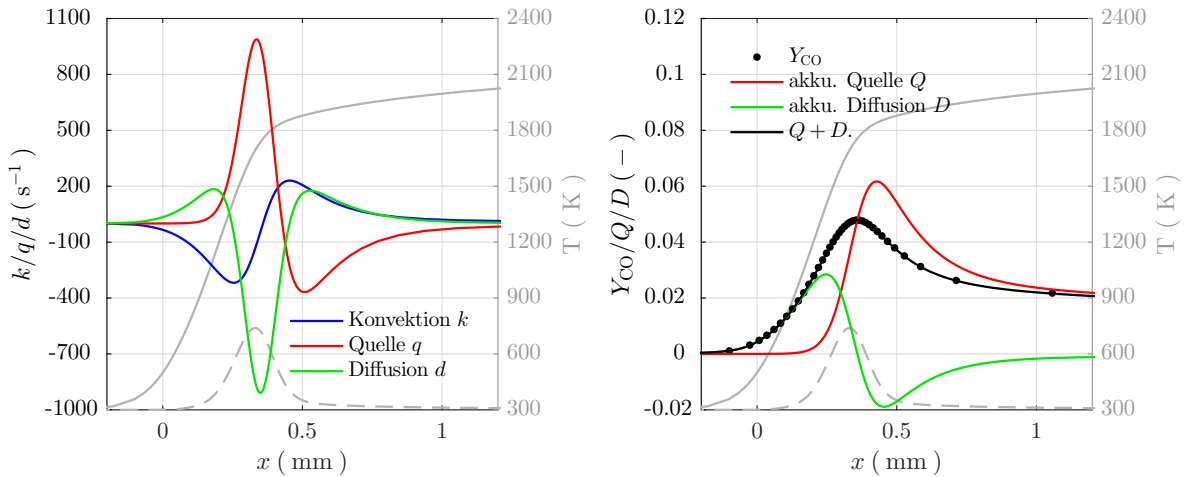


Abbildung 4.19: Links: Quellterm q , Diffusionsterm d und Konvektionsterm k für CO_2 entsprechend Gleichung 4.11. Rechts: Integral des Quellterms Q , des Diffusionsterms D entsprechend den Gleichungen 4.14 und 4.13 sowie deren Summe und der Massenbruch von CO . Zur Orientierung ist die Temperatur (grau) und die qualitative Wärmefreisetzungsrage (grau gestrichelt) eingezeichnet.

4.4.4.3 Anwendung der Lagrange'schen Analysemethode auf das SWQ-Szenario

In diesem Abschnitt wird die zuvor beschriebene Analysemethode auf das SWQ-Szenario angewendet, um die Herkunft der hohen CO-Konzentration nahe der Wand zu klären. Hierfür wird das detaillierteste Simulationsergebnis, welches auf dem GRI-Mechanismus und der Mixture-Averaged-Diffusionsbehandlung basiert, verwendet. Für die Integration des Diffusionsterms d und des Quellterms q , welche in Abbildung 4.20 (oben) dargestellt sind, werden die Gleichungen 4.12 bis 4.14 entlang von insgesamt 500 Stromlinien integriert, wobei ein explizites Euler-Verfahren verwendet wird. Hierbei wird eine Zeitschrittweite von einem Zehntel der Gitterweite, bezogen auf die lokale Geschwindigkeitsmagnitude, verwendet, wodurch sich eine mittlere Zeitschrittweite von etwa 10^{-4} s ergibt. Die fiktiven Partikel werden hierbei am Einlass des Rechengebietes initialisiert und die Integrationskonstanten D_0 und Q_0 zu null gesetzt. Für den Abschnitt des Einlasses, bei welchem heißes Abgas angenommen wird, sind diese Integrationskonstanten zwar von Null verschieden, da aber die zugehörigen Stromlinien weit von der FWI-Zone entfernt verlaufen, ist dies unerheblich für die nachfolgend dargestellten Ergebnisse. Nach Interpolation der integrierten Terme D und Q auf das äquidistante Gitter, erhält man die in Abbildung 4.20 (unten) dargestellten Verteilungen. Sie enthalten somit die Information, wie sich der CO-Massenbruch lokal aus den beiden Anteilen (diffusiver bzw. reaktiver Anteil) zusammensetzt.

Um die Ergebnisse der Analyse in den Kontext der gemessenen CO-Konzentration und Temperatur zu bringen, werden die integrierten Terme entlang wandnormaler Linien an den Position $x_q = -0,550$ mm, $-0,050$ mm, $0,450$ mm und $0,950$ mm (in Abbildung 4.20 mit gestrichelten Linien markiert) extrahiert und in 4.21 dargestellt. Beide Abbildungen werden im Folgenden genutzt, um in Kombination mit Gleichung 4.15 den grundlegenden Mechanismus hinter den hohen CO-Konzentrationen in Wandnähe zu erläutern.

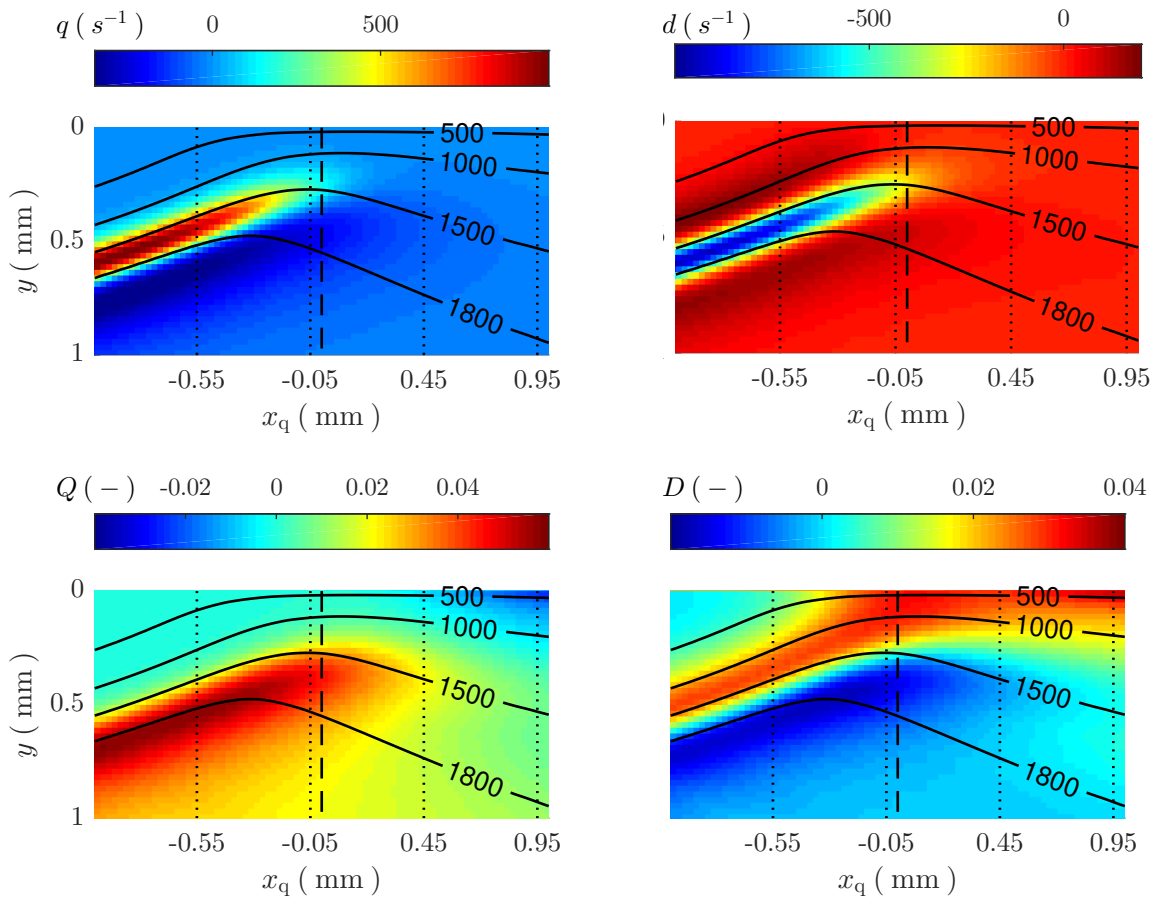


Abbildung 4.20: Quellterm q (oben links), Diffusionsterm d (oben rechts), integrierter Quellterm Q (unten links), integrierter Diffusionsterm D (unten rechts) mit Temperaturisolines in Kelvin (—), der Position des Kontaktpunktes (---) und der Positionen x_q in Hauptstromrichtung (....).

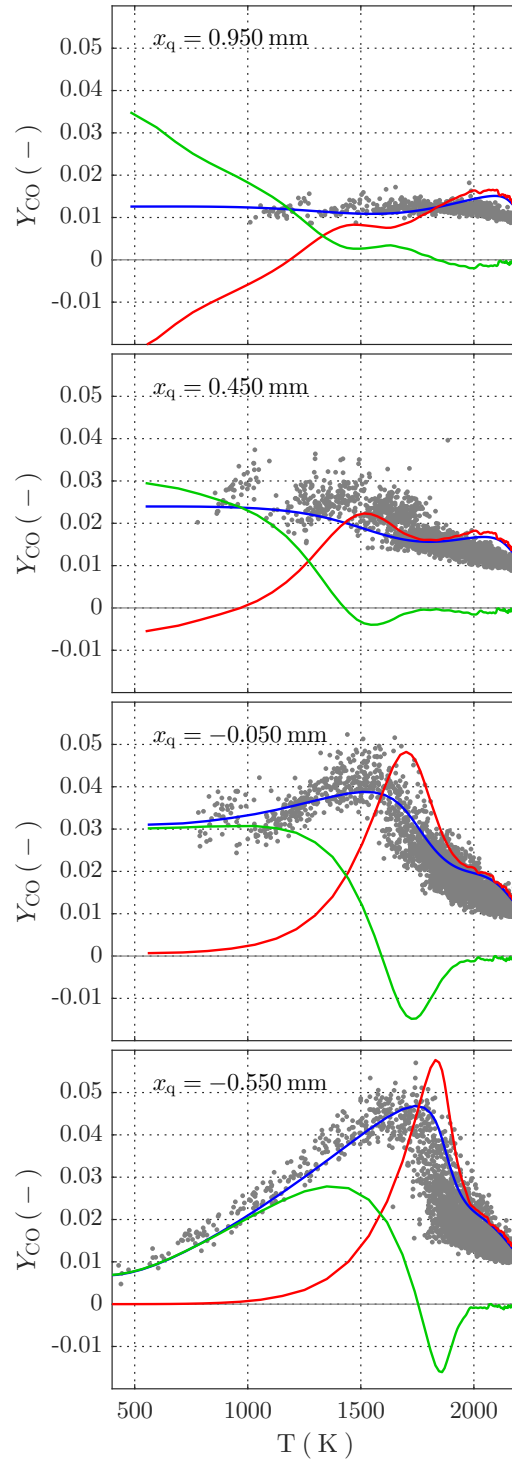


Abbildung 4.21: Wandnormale Verläufe: Integrierter Quellterm Q (—), integrierter Diffusionsterm D (—), Gesamtmassenbruch des Kohlenmonoxids Y_{CO} (—) über der Temperatur zusammen mit Messdaten (\bullet).

Beginnend bei $x_q = -0,550$ mm, wo die Flamme von der Wand beinahe unbeeinflusst ist, findet man die bekannte Struktur einer frei propagierenden Flamme wieder: Wie in Abbildung 4.21 zu sehen ist, hat der integrierte Quellterm einen großen Beitrag im Hochtemperaturbereich, wo Y_{CO_2} maximal ist. Entsprechend seiner physikalischen Bedeutung trägt der diffusive Term lediglich zur Umverteilung der Größe bei und hat keinen Nettobeitrag in einem globalen Sinne. Ähnlich des Verlaufs, der in Abbildung 4.19 (rechts) dargestellt ist, stammt Y_{CO_2} in der Vorwärmzone ($T < 1000$ K) ausschließlich aus einem diffusiven Transport, welcher folglich einen negativen Beitrag in der Reaktionszone ausweist. Eine signifikante und entscheidende Änderung dieser Verläufe kann bei der zweiten Position ($x_q = -0,050$ mm) in der Nähe des Kontaktpunktes beobachtet werden. Dort sind hohe CO-Werte sogar bei den niedrigsten Temperaturen - also in unmittelbarer Wandnähe - zu sehen. Zudem ist zu erkennen, dass der Beitrag des Quellterms qualitativ gleich geblieben ist, während der diffusive Term deutlich zugenommen hat. Entsprechend der Profile und der Gleichung 4.15 ist offensichtlich, dass dieser den akkumulierten CO-Wert dominiert. Dieses Ergebnis lässt sich auch aus Abbildung 4.20 ableiten, welche zeigt, dass der CO-Anstieg in Richtung des Kontaktpunktes, ausgehend von einer Position stromauf, durch den diffusiven Term dominiert wird, wobei der Quellterm keinen Beitrag liefert. Diese Beobachtung kann anhand Abbildung 4.22 erläutert werden. Sie zeigt Stromlinien, die

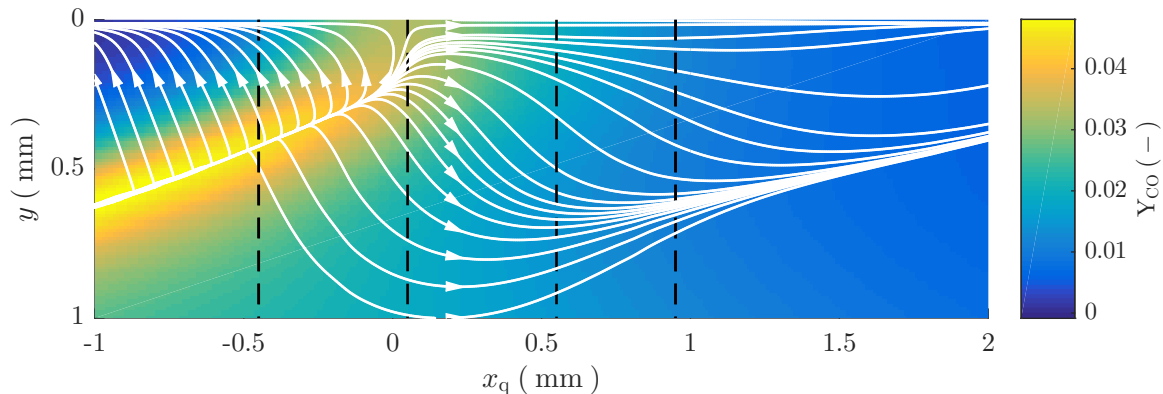


Abbildung 4.22: CO-Massenbruch als Farbverteilung und diffusiver Fluss als Stromlinien basierend auf dem $\nabla(W \cdot Y_{CO})$ -Vektorfeld.

nicht die Konvektion visualisieren, sondern entlang der Diffusionsgeschwindigkeit orientiert sind. Sie lassen sich durch Integration des Gradienten $\nabla(W \cdot Y_{CO})$ erzeugen, welcher gemäß Gleichung 2.28 zur Diffusionsgeschwindigkeit parallel ist. Innerhalb der FWI-Zone kommen zwei Mechanismen zum Tragen: Dies ist zunächst einmal die Diffusion normal zur Flammenfront. Wie erwähnt, ist diese Diffusion auch in der adiabaten Flamme wirksam, wie es anhand der Diffusionsstromlinien in Abbildung 4.22, welche die Flamme orthogonal verlassen, zu sehen ist. Nahe der Wand jedoch werden die Gradienten steiler. Zudem ist dort keine Frischgasregion mehr vorhanden, in welche eine Diffusion möglich wäre. Stattdessen wird die Diffusion dort durch die Wand blockiert. Dieser Mechanismus ist ebenso in einem HOQ-Szenario zu finden. Der zweite Grund für die großen Beiträge der Diffusion, die in den Abbildungen 4.20 und 4.21 sichtbar sind, kann ebenfalls in Abbildung 4.22 nachvollzogen werden. Nahe der Wand verlassen die Diffusionsstromlinien die Flamme nicht mehr in orthogonaler Richtung. In dieser Region führen die niedrigen Temperaturen

zu einer geringen CO-Bildung, sodass sich auch Gradienten tangential zur Flammenfront bilden. Der resultierende diffusive Fluss von der Region der CO-Bildung hin zur Wand wird in Abbildung 4.22 offensichtlich. Diese qualitativen Erkenntnisse kombiniert mit der Quantifizierung auf Basis der Lagrange'schen Analysemethode (Abbildungen 4.20 und 4.21) fassen den Hauptteil der Mechanismen zur Erklärung der hohen wandnahen CO-Konzentrationen zusammen.

Es bleiben noch nachrangige Prozesse stromab des Kontaktpunktes zu klären, um das Bild zu vervollständigen. Der Rückgang des Kohlenmonoxids stromab des Kontaktpunktes ist durch zwei überlagerte Prozesse begründet. Der erste ist wiederum ein Diffusionsprozess. Weiter von der Wand entfernt, befindet sich ein großes Gebiet im Gleichgewichtszustand, ($Y_{\text{CO}} \approx 0,01$, siehe z. B.: $x_q = -0,550$ mm in Fig. 4.21), welches durch die adiabate Flamme entsteht. In Abwesenheit von chemischen Reaktionen wird ein diffusiver Fluss in dieses Gebiet initiiert, wie anhand der divergierenden Diffusionsstromlinien stromab des Kontaktpunktes in Abbildung 4.22 erkennbar ist. Dieser Prozess ist jedoch sehr langsam und kann deshalb nicht allein die Entwicklung des Y_{CO} erklären, die in Abbildung 4.21 quantitativ dargestellt ist. Bei $x_q = 0,450$ mm nimmt zwar der diffusive Anteil des Kohlenmonoxids ab, jedoch ist der Gesamtwert von CO nahe der Wand kleiner als der diffusive Anteil, was eine schnellere Reduktionsrate voraussetzt. Diese Entwicklung ist bei $x_q = -0,950$ mm noch deutlicher zu erkennen. Dort reduziert sich Y_{CO} nahe der Wand, während der diffusive Anteil sogar etwas ansteigt. Diese Gegebenheiten entstehen durch einen zweiten Prozess, der sich in unmittelbarer Wandnähe abspielt - nämlich, dass dort ein negativer Beitrag des chemischen Quellterms auftritt. Aus chemischer Sicht ist dieser negative Beitrag der Tatsache geschuldet, dass ein zunehmender Anteil des Gases von der Wand abgekühlt wird. Zahlreiche Elementarreaktionen beschreiben reversible Prozesse der CO_2 -Bildung ausgehend von CO, wobei sich der Gleichgewichtswert für sinkende Temperaturen auf die Seite von CO_2 verschiebt. In Abbildung 4.20 (unten) ist zu erkennen, dass sich die negativen Quellterme zu einem negativen Beitrag nahe der Wand bei $x_q = 0,450$ mm und in noch deutlicherer Weise bei $x_q = -0,950$ mm aufakkumulieren und damit den finalen CO-Massenbruch erklären.

4.5 Zusammenfassung

Im ersten Abschnitt dieses Kapitels wurden die beiden idealisierten Formen des Flammenverlöschens vorgestellt. Es folgte die Untersuchung des HOQ-Szenarios anhand zahlreicher Simulationen unter Variation verschiedener Parameter. Hierbei wurde sichtbar, dass die FGM nicht in der Lage ist, die experimentell untersuchte Entwicklung des CO im Rahmen des transienten Prozesses wiederzugeben. Die REDIM-Simulation, welche die Gradienten der Konfiguration ausnutzt, sowie die Detaillierte-Chemie-Simulation konnten die CO-Konzentrationen im Rahmen der experimentellen Streuung reproduzieren. Es wurde zudem klar, dass der Soret-Effekt in diesem Szenario nur eine untergeordnete Rolle spielt. Hinsichtlich der ebenfalls gemessenen Temperatur wurde festgestellt, dass diese von keiner Simulation erklärt werden konnte. Im letzten Abschnitt dieses Kapitels wurde der SWQ-Brenner, welcher von [48] experimentell untersucht wurde, betrachtet. Um die CO-Verteilung zu analysieren, welche sich im Vergleich zur adiabaten Flamme stark unterscheidet, wurden Detaillierte-Chemie-Simulationen in einer Subregion des Brenners durch-

geführt. Im Gegensatz zu den Simulationen mit Tabellierter Chemie konnte die Detaillierte Chemie die CO-Akkumulation nahe der Wand reproduzieren. Es wurde eine Lagrange'sche Analyseverfahren eingeführt und angewendet, um den Beitrag der Diffusion und der chemischen Quellen zu bewerten. Es zeigte sich, dass die hohen CO-Konzentrationen in der Nähe der Wand von einem diffusiven Transport herrühren. Dabei wird das CO in einem Gebiet gebildet, welches nicht von dem Enthalpieentzug durch die Wand betroffen ist und die chemische Reaktivität entsprechend hoch bleibt. In unmittelbarer Wandnähe findet man einen negativen Quellterm für CO, sodass das ankommende CO chemisch zu CO₂ reagiert.

Kapitel 5

Modellentwicklung

Wie in Kapitel 4 klar wurde, lässt das FGM-Verbrennungsmodell keine zuverlässige Vorhersage von Kohlenmonoxid im Rahmen von FWI-Szenarien zu. In Abschnitt 5.1 dieses Kapitels wird dieses Defizit anhand des SWQ-Szenarios zunächst untersucht. Hierbei wird das Ergebnis der Detaillierten-Chemie-Rechnung genutzt, um die Fehlersystematik des FGM-Modells zu ergründen. Die Analyse basiert dabei auf der Speziestransportgleichung, welche hierzu in den Zustandsraum transformiert wird. Im Zustandsraum wird die physikalische Signifikanz der skalaren Dissipationsraten deutlich, welche im Prozess der FGM-Tabellenerzeugung implizit vorgegeben werden. In Abschnitt 5.2 wird das Lösen der Speziestransportgleichung im Zustandsraum demonstriert. Hierbei wird das Potenzial einer Tabellierungsmethode analysiert, welche auf der direkten Nutzung der skalaren Dissipationsraten als Kontrollvariable basiert. Im letzten Abschnitt dieses Kapitels wird zunächst eine Motivation des anschließend beschriebenen Tabellierungskonzeptes gegeben. Es werden eine geeignete Erzeugungsstrategie für die Berechnung von chemischen Zuständen vorgestellt sowie Kriterien zur Auswahl einer Kontrollvariable formuliert. Weiterhin wird die Umsetzung des entwickelten Tabellierungskonzeptes detailliert. Es folgt ein Verifizierungsabschnitt, in welchem die Implementierung des Tabellenkonzeptes überprüft wird. Schließlich folgen eine Analyse und eine Bewertung der neuen Chemietabelle anhand des SWQ-Szenarios.

5.1 Analyse der FGM und der REDIM [28]

Die in diesem Abschnitt vorgestellte Analyse des FGM-Modells basiert auf der Speziestransportgleichung 5.3, wie sie in Kapitel 2 hergeleitet wurde. Wie nachfolgend gezeigt, wird sie zur Analyse in den Zustandsraum transformiert. Die anhand des SWQ-Ergebnisses der FGM-Simulation erfolgte Auswertung der einzelnen Terme der transformierten Transportgleichung erlaubt schließlich die Quantifizierung einer hypothetischen Interaktion der eindimensionalen Flamelets der FGM-Tabelle. Diese Interaktion kann wegen der Tabellierungsannahmen im Rahmen des FGM-Modells nicht stattfinden. Es wird deutlich, dass in Wandnähe diffusive Flüsse des Kohlenmonoxids ein Verlassen des tabellierten Manifolds bewirken würden, sodass es zu Abweichungen des chemischen Zustands kommt. Basierend auf der Analyse, werden schließlich Verbesserungen hinsichtlich des Tabellierungsprozesses vorgeschlagen. Hierzu wird zunächst das Ergebnis der Detaillierten Chemie-Rechnung zur Erstellung einer Tabelle genutzt, welche gleichzeitig als Referenz dient. Die mit dieser Tabelle durchgeführte Simulation zeigt, dass eine eindeutige Abbildung der chemischen Zustände des betrachteten Szenarios auf zwei Kontrollvariablen grundsätzlich möglich ist.

Als Zweites wird eine alternative Tabellierungsmethode, die reaction-diffusion manifold (REDIM) [14, 60] eingeführt. Für die Erstellung einer Chemietabelle im Kontext der REDIM-Methode sind Abschätzungen der in der Simulation zu erwartenden Spezies- und Enthalpiegradienten nötig. Diese werden für die Bewertung der Methode anhand einer eindimensionalen HOQ-Simulation vorgenommen. Hierdurch lässt sich, wie nachfolgend gezeigt, eine erhebliche Verbesserung der Vorhersagegenauigkeit im Vergleich zur FGM erreichen. Die in diesem Abschnitt gezeigten Inhalte wurden in [28] veröffentlicht.

5.1.1 Die FGM-Tabellenerzeugung

Die FGM-Tabellenerzeugung basiert auf einer Serie von eindimensionalen Flammenberechnungen, welche mit dem Detaillierte-Chemie-Löser CHEM1D [16] unter Nutzung der Annahme $Lewis = 1$ durchgeführt werden. Die berechneten stöchiometrischen Flammen sind dabei isenthalpisch, d. h. die Enthalpien ändern sich nicht entlang der räumlichen Koordinate. Die einzelnen Flammensimulationen werden jedoch für verschiedene Enthalpieniveaus erzeugt, wobei die Variation des Enthalpieniveaus durch Vorwärmen des Frischgases bzw. durch eine Enthalpiesenke in der Vorwärmzone der Flamme (brennerstabilisierte Flammenkonfiguration (BSF) [72]) realisiert wird. Abbildung 5.1 zeigt einige dieser Flammensimulationen im CO_2 - h -Raum, dessen Koordinaten den Kontrollvariablen entsprechen. Wie zu sehen ist, stellen sich die Flammen als horizontale Linien (Isenthalpe) dar, welche während der Tabellenerzeugung nicht miteinander interagieren. In der Abbildung sind beispielhaft die Temperatur und der CO-Massenbruch farblich dargestellt, welche, wie zuvor erwähnt, experimentell für die betrachtete Konfiguration ermittelt wurden. Die chemischen Zustände der eindimensionalen Simulationen werden schließlich zu einer zweidimensionalen Tabelle zusammengefügt. Bei dem FGM-Ansatz wird, wie

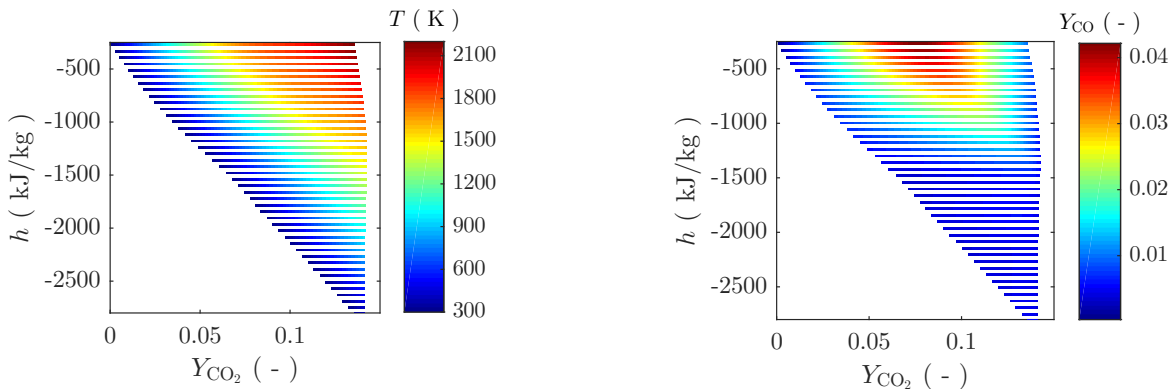


Abbildung 5.1: Illustration der FGM-Tabellenerzeugung: Temperatur (links) und Massenbruch von CO (rechts) im CO_2 - h -Raum entlang von einigen eindimensionalen Flammensimulationen.

auch in Kapitel 3 erwähnt, angenommen, dass sich der chemische Zustand, der in der SWQ-Simulation auftritt, durch die beiden Kontrollvariablen eindeutig abbilden lässt. Wie später anhand der direkten Tabellierung der Detaillierten-Chemie-Simulation des SWQ-Szenarios deutlich wird, ist diese Annahme tatsächlich gerechtfertigt. Allerdings, und dies wird im Folgenden ebenfalls deutlich, ist neben der Wahl der Kontrollvariablen auch entscheidend, welche Annahmen hinsichtlich der skalaren Dissipationsraten gemacht

werden. Im Kontext der FGM werden diese implizit über die Festlegung der Randbedingungen der eindimensionalen Flammenrechnungen gemacht. Wesentlich ist hierbei die skalare Dissipationsrate der Enthalpie, welche entsprechend Gleichung 2.41 quadratisch zum räumlichen Gradienten der Enthalpie skaliert. Da die einzelnen eindimensionalen Flammenberechnungen, auf welchen die FGM-Tabelle basiert, keine Enthalpiegradienten aufweisen, wird die skalare Dissipationsrate der Enthalpie während des Tabellengenerierungsprozesses implizit zu null angenommen.

5.1.2 Analyse der Fehlersystematik der FGM

Zur Analyse des Versagens des FGM-Modells hinsichtlich der Vorhersage des Kohlenmonoxids wird die Detaillierte-Chemie-Rechnung unter Verwendung des GRI-Mechanismus unter der Annahme $\text{Lewis} = 1$ als Referenz herangezogen. Zunächst wird das räumliche Gebiet des relativen CO-Fehlers anhand einer Fehlerkarte veranschaulicht, welche in Abbildung 5.2 dargestellt ist. Um einen möglichen Einfluss von Abweichungen der Flammen-

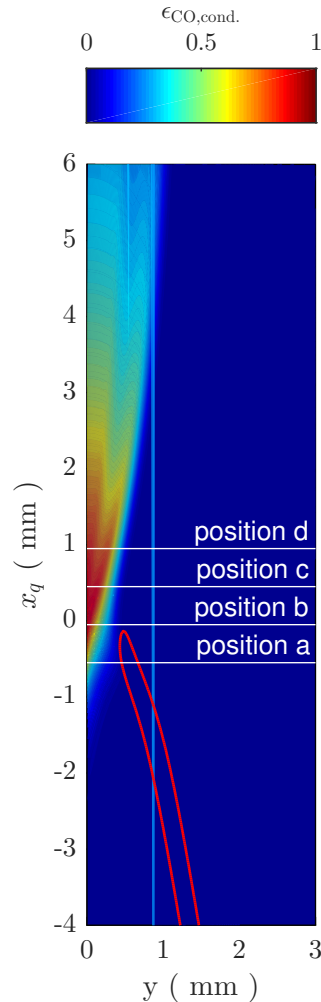


Abbildung 5.2: Relativer Fehler des CO-Massenbruchs des FGM-Ergebnisses entsprechend Gleichung (5.1).

position zwischen den beiden Simulationen zu vermeiden, wird der Fehler mit CO-Werten berechnet, welche auf CO₂ und Enthalpie konditionierten sind:

$$\epsilon_{\text{CO,cond.}} = \left| \frac{Y_{\text{CO}}^{\text{FGM}} - Y_{\text{CO}}^{\text{DC}}}{Y_{\text{CO}}^{\text{DC}}} \right|_{h, \text{CO}_2}. \quad (5.1)$$

Das heißt, dass die in Gleichung 5.1 verwendeten Werte für CO der beiden Simulationen bei gleichen CO₂- und Enthalpie-Werten vorliegen. Abbildung 5.2 zeigt, dass sich der relative Fehler, wie erwartet, auf das Gebiet der Flamme-Wand-Interaktion beschränkt. In dem Gebiet, in dem eine adiabate Flamme vorliegt, also stromauf von Position (a), stimmen die beiden Simulationen perfekt überein. Nähert man sich von dort aus dem Gebiet, in welchem der Wärmeverlust stattfindet, steigt der Fehler deutlich an, wohingegen er stromab entsprechend dem zurückgehenden Wandwärmefluss wieder abfällt.

Zur Transformation der Speziestransportgleichung wird die Annahme

$$Y_k = Y_k(Y_{\text{CO}_2}, h) \quad (5.2)$$

verwendet, welche der FGM-Tabelle zugrunde liegt. Somit kann die Gültigkeit der Annahme durch Auswertung der transformierten Gleichung überprüft werden. Unter den weiteren Annahmen, welche in Abschnitt 2.1.8 erläuterten wurden, ergibt sich somit

$$0 = \underbrace{\chi_{\text{CO}_2} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Y_{\text{CO}_2}^2}}_{\text{Term I}} + \underbrace{2\chi_{h, Y_{\text{CO}_2}} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Y_{\text{CO}_2} \partial h}}_{\text{Term II}} + \underbrace{\chi_h \frac{\partial^2 Y_k}{\partial h^2}}_{\text{Term III}} + \underbrace{\dot{\omega}_k - \frac{\partial Y_k}{\partial Y_{\text{CO}_2}} \dot{\omega}_{\text{CO}_2}}_{\text{term IV}}. \quad (5.3)$$

Die Richtigkeit der Annahme wird im Folgenden durch Auswerten der Simulationsergebnisse der Detaillierten-Chemie-Rechnung überprüft. Zur Auswertung der vier Terme müssen, wie in Gleichung 5.3 bzw. 2.41 zu sehen ist, sowohl räumliche Gradienten der Enthalpie und der Kontrollvariable als auch zweite Ableitungen der Spezies k im Kontrollvariablenraum berechnet werden. Für die Berechnung der Gradienten der Enthalpie und der Kontrollvariable, welche auf einem kartesischen Gitter vorliegen, werden zunächst bikubische Interpolationsfunktionen ermittelt, die dann analytisch abgeleitet und ausgewertet werden. Die Berechnung der zweiten Ableitung der Spezies k im Kontrollvariablenraum gestaltet sich aufwändiger, da die Daten dort auf einem stark verzerren Gitter vorliegen. Hinzu kommt, dass das Bilden der zweiten Ableitung im Allgemeinen zur Verstärkung numerischer Fehler neigt. Das Anpassen eines zweidimensionalen Polynoms vierter Ordnung und das anschließende analytische Ableiten und Auswerten stellte sich als ein sehr robustes Verfahren heraus. Die beiden genannten Methoden, die Interpolationsfunktion wie auch die polynomiale Regression, werden mit der *Matlab curve fitting toolbox* [66] berechnet. Die Verbleibenden Unsicherheiten bei der Berechnung der Terme, sind hinreichend klein, sodass sie eine sinnvolle Interpretation der Ergebnisse zulassen.

Abbildung 5.3 zeigt die ausgewerteten Terme anhand der CO-Simulationsergebnisse der Detaillierten Chemie und der FGM-Rechnung. Die Ergebnisse für die beiden weiteren Simulationen SWQT und REDIM werden in Abschnitt 5.1.3 besprochen. Die gezeigten Profile entsprechen dabei den wandnormalen Linien, wie sie in Abbildung 4.10 markiert sind und auch schon zuvor verwendet wurden. Wie aus der Transportgleichung 5.3 ersichtlich ist, summieren sich die Terme zu null, sofern Annahme 5.2 erfüllt ist. In Abbildung 5.3

ist die Summe der Terme in schwarz eingezeichnet, wobei zu sehen ist, dass die Detaillierte Chemie Gleichung 5.3 bis auf geringfügige Ungenauigkeiten gut erfüllt. Dieses Ergebnis zeigt zunächst, dass Annahme 5.2 grundsätzlich gerechtfertigt ist. Während Position (a) durch Term I und Term IV dominiert werden, kommen an den Positionen (b)-(c) signifikante Anteile von Term II und III hinzu. Stromab nehmen alle Terme stark ab. Betrachtet man die Auswertungen anhand des FGM-Ergebnisses, so ist zu sehen, dass dieses die Glei-

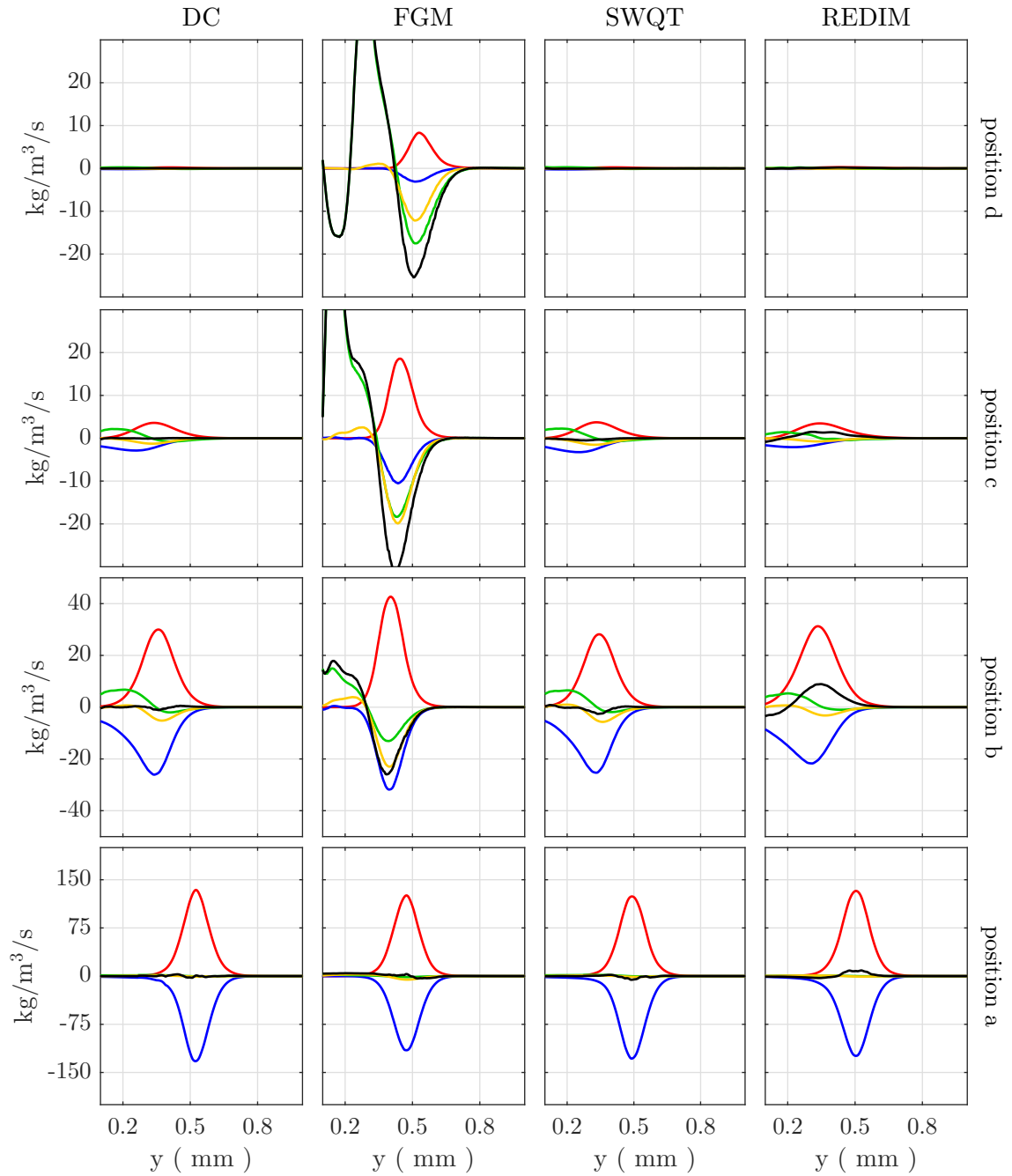


Abbildung 5.3: Auswertung der einzelnen Terme der Speziestransportgleichung im Zustandsraum (5.3): Term I (—), Term II (—), Term III (—), Term IV (—), Summe aller Terme (—).

chung 5.3 für Position (a), an welcher die Flamme noch nicht von der Wand beeinflusst wurde, gut erfüllt. An Position (b) und (c) hingegen weicht die Summe zunehmend von null ab und reduziert sich in Position (d) nur langsam. Vergleicht man die Terme der FGM-Auswertung mit denen der Detaillierten Chemie an Position (c), so ist festzustellen, dass die Abweichung der Summe von Term III dominiert wird, dessen Betrag deutlich überschätzt wird. Diese Feststellung lässt sich anhand der CO-Verteilung im Zustandsraum erklären, welche sowohl für die Detaillierte Chemie als auch für die FGM-Tabelle in Abbildung 5.4 dargestellt ist. In Abschnitt 5.1.1 wurde erwähnt, dass im Rahmen der

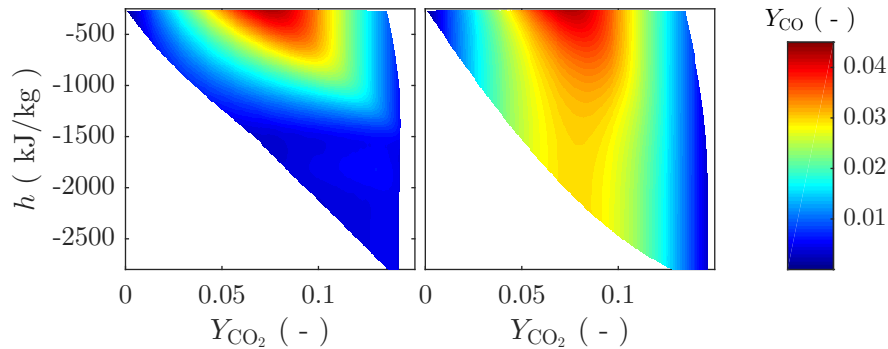


Abbildung 5.4: CO-Massenbruch im Zustandsraum für die FGM-Tabelle (links) und die Detaillierte Chemie-Rechnung der SWQ-Konfiguration (rechts).

FGM-Tabellengenerierung implizit eine skalare Dissipationsrate der Enthalpie von null angenommen wird. Wie in Gleichung 5.3 zu sehen ist, kommt dieser Größe die Funktion eines Diffusionskoeffizienten für die Diffusion in Richtung der Enthalpieachse zu. Durch die Annahme einer verschwindenden skalaren Dissipationsrate der Enthalpie wird also während der Tabellenerzeugung eine Diffusion von CO in Enthalpierichtung verhindert. Steile CO-Gradienten entlang der Enthalpiekoordinate sind die Folge, welche in Abbildung 5.4 (links) zu sehen sind. Im Gegensatz hierzu zeigt 5.4 (rechts) die CO-Verteilung der Detaillierten-Chemie-Rechnung mit inhärent korrekten skalaren Dissipationsraten, welche zu abgeflachten CO-Gradienten in Enthalpierichtung führen. Bei der Auswertung von Term III auf Basis der FGM-Simulation wird schließlich eine näherungsweise korrekte, aber deutlich von null verschiedene skalare Dissipationsrate der Enthalpie mit einem fälschlicherweise sehr steilen Gradienten von CO in Enthalpierichtung kombiniert, wodurch es zur besagten Überschätzung des Terms kommt. Die vorläufige Schlussfolgerung hieraus ist, dass skalare Dissipationsraten nicht vernachlässigt werden dürfen, wenn diese einen signifikanten Einfluss auf die Prozesse haben, die sich in der betrachteten Konfiguration abspielen.

5.1.3 Analyse der REDIM

Im Folgenden wird geklärt, ob das Simulationsergebnis der Detaillierten Chemie mit Tabellierter Chemie auf Basis von zwei Kontrollvariablen prinzipiell reproduziert werden kann. Hierzu wird das Ergebnis der Detaillierten Chemie zur direkten Tabellenerzeugung genutzt. Da zur Tabellierung eine Detaillierte-Chemie-Rechnung der später zu simulierenden SWQ-Konfiguration erforderlich ist, dient dieser Tabellierungsansatz nicht der

Rechenkostenersparnis, sondern lediglich des prinzipiellen Nachweises der Machbarkeit und der maximal zu erreichenden Qualität der Chemiereduktion.

In einem zweiten Schritt wird das REDIM-Modell angewendet und ausgewertet. Sie stellt einen Kompromiss zwischen Rechenkosten auf der einen Seite und Vorhersagegenauigkeit auf der anderen Seite dar und realisiert damit einen praktikablen Chemiereduktionsansatz.

5.1.3.1 Direkte Tabellierung der Detaillierten-Chemie-Ergebnisse

Die direkte Tabellierung der Detaillierten-Chemie-Ergebnisse stellt eine konsequente Methode der Chemiereduktion dar, welche inhärent die korrekten skalaren Dissipationsraten enthält, da sich diese während der Simulation frei und entsprechend der Konfiguration entwickeln konnten. Die eigentliche Tabellierung beinhaltet die Projektion des gesamten chemischen Zustands auf die Kontrollvariablen (Y_{CO_2} und Enthalpie), wobei die sich ergebende Tabelle im Folgenden mit Sidewall-quenching-Tabelle (SWQT) bezeichnet wird. Die Simulation auf Basis dieser Chemietabelle führt zu den in Abbildung 5.5 dargestellten Ergebnissen. Wie zu sehen ist, liefert die SWQT-Simulation Temperaturverläufe und CO-Verteilungen, die sich für alle Positionen beinahe perfekt mit denen der Detaillierten-Chemie-Rechnung decken. Dies beweist, dass Tabellierung im Allgemeinen einen sehr hohen Grad an Vorhersagegenauigkeit erreichen kann, wenn die zugrunde liegenden Annahmen angemessen sind. Abbildung 5.6 gibt die relativen Fehler hinsichtlich CO und der Temperatur wieder, welche sich auf das Ergebnis der Detaillierten Chemie beziehen und mit

$$\epsilon_T = \frac{T - T^{\text{DC}}}{T^{\text{DC}}}, \quad \epsilon_{\text{CO}} = \frac{Y_{\text{CO}} - Y_{\text{CO}}^{\text{DC}}}{Y_{\text{CO}}^{\text{DC}}} \quad (5.4)$$

definiert werden. Es werden lediglich geringfügige Abweichungen für CO an der Position (a) sichtbar. Der relative Fehler tritt an dieser Position hervor, da dort der Gradient von CO im Vergleich zu seinem Absolutwert groß ist. Bei einer geringfügigen Abweichung der Flammenposition der beiden Simulationen führt dies zu einer großen Verstärkung des relativen Fehlers. Die Abweichung der Flammenposition ihrerseits könnte dabei die Folge von Interpolationsfehlern im Rahmen des Tabellierungsprozesses sein, welche durch eine lokal unzureichende Auflösung zustande kommen. Weiterhin zeigt Abbildung 5.3 (dritte Spalte), dass die SWQT-Simulation Gleichung 5.3 erfüllt. Da für die Erzeugung der SWQT-Tabelle eine rechenintensive zweidimensionale Detaillierte-Chemie-Rechnung erforderlich ist, ergibt sich, wie schon zuvor erwähnt, keine Reduktion der Gesamtrechnenzeit.

5.1.3.2 Bewertung der REDIM im Kontext der wandnahen Verbrennung

Das Ziel des REDIM-Ansatzes ist es, den Rechenaufwand der Simulation zu reduzieren und dennoch den realen skalaren Dissipationsraten der betrachteten Konfiguration Rechnung zu tragen. Hierbei erstet der Vorteil der REDIM aus der Tatsache, dass bereits eine ungefähre Abschätzung der skalaren Dissipationsraten zu signifikanten Verbesserungen des Simulationsergebnisses gegenüber dem FGM-Ergebnis führt. Diese Abschätzungen sind jedoch für die betrachtete Konfiguration zunächst unbekannt und müssen im Voraus gefunden werden. Da dies für komplexe Geometrien, für deren Simulation eine

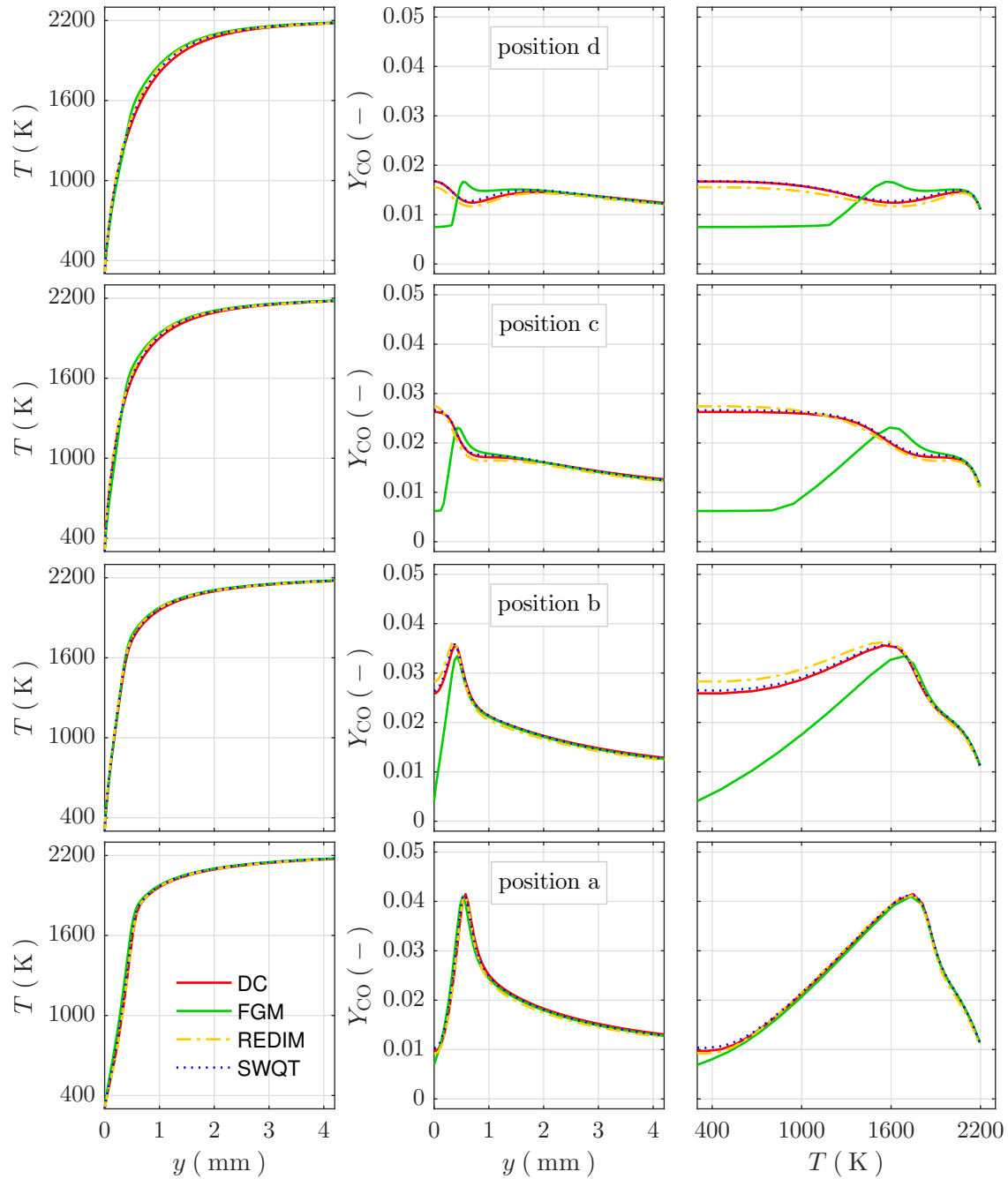


Abbildung 5.5: Profile des CO-Massenbruchs (mittig), der Temperatur (links) und ihr Verlauf im Zustandsraum (rechts) für die Position (a) bis (d), welche in Abbildung 4.10 gekennzeichnet sind.

Chemiereduktion notwendig ist, häufig der Fall ist, werden für die Abschätzung einfache Konfiguration genutzt, welche die Physik der komplexen Geometrie möglichst nahekommen. Entsprechend wird für die hier verwendete REDIM-Tabelle eine Abschätzung der Gradienten anhand einer eindimensionalen HOQ-Simulation unter Verwendung der Detaillierten Chemie vorgenommen, welche nur einen Bruchteil des Aufwandes der zweidimensionalen SWQ-Konfiguration darstellt. Um die Bedingungen der SWQ-Konfiguration

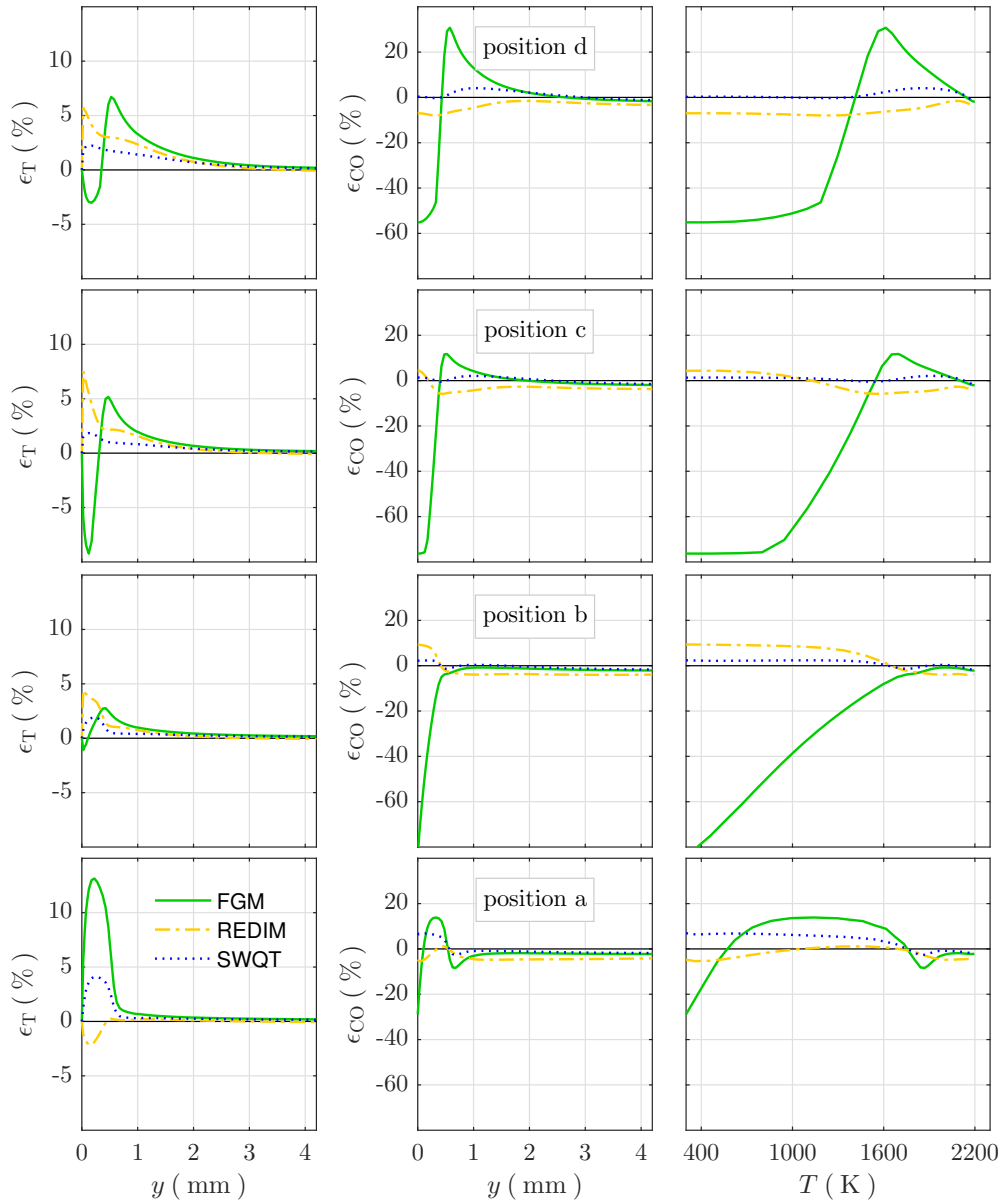


Abbildung 5.6: Profile des relativen Fehlers von CO entsprechend Definition 5.4 (mittig), analog für die Temperatur (links) und ihr Verlauf im Zustandsraum (rechts) für die Position (a) bis (d), welche in Abbildung 4.10 gekennzeichnet sind.

zu mimen, werden für die HOQ-Simulation das gleiche Äquivalenzverhältnis, die gleiche Frischgas- und die gleiche Wandtemperatur angenommen. Damit befinden sich die Spezies- und Enthalpiegradienten und damit auch die skalaren Dissipationsraten in vergleichbaren Größenordnungen.

Ein qualitativer Vergleich der REDIM- und der FGM-Ergebnisse mit dem Ergebnis der Detaillierten Chemie ist in Abbildung 5.7 anhand der CO-Verteilung im Zustandsraum gegeben. Wie bereits zuvor in Abbildung 5.4 angedeutet, gibt das Detaillierte-Chemie-Ergebnis im Gegensatz zur FGM-Tabelle den physikalischen Diffusionsprozess des Kohlenmonoxids in Enthalpierichtung wieder, wodurch sich vertikale Iso-CO-Linien ergeben.

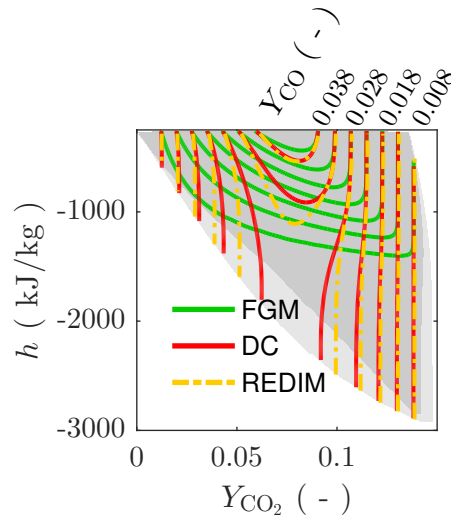


Abbildung 5.7: Isolinien des CO-Massenbruchs der FGM- und der REDIM-Tabelle im Vergleich mit dem Ergebnis der Detaillierten-Chemie-Simulation. Die Abdeckung des Zustandsraums der REDIM-Tabellen und der Detaillierten-Chemie-Rechnung ist in hellgrau, die entsprechende Abdeckung der FGM-Tabelle ist in dunkelgrau markiert.

Dieses Verhalten ist nun auch in der Chemietabelle auf Basis der REDIM-Methode sichtbar, wobei das CO an der Wand (d. h. bei niedrigen Enthalpien) geringfügig überschätzt wird. Wie später noch erläutert wird, ist diese Überschätzung die Folge der Gradientenabschätzung anhand des HOQ-Szenarios, welches größere Gradienten als die laminare SWQ-Simulation aufweist. Dieser Gradient, welcher in Gleichung 5.3 in Form der skalaren Dissipationsrate χ_h auftritt, führt weiterhin zu einer nicht verschwindenden Summe der rechten Seite, wie in Abbildung 5.3 (vierte Spalte) an den Position (b) und (c) zu sehen ist. Um die Vorhersagefähigkeit der REDIM im physikalischen Raum zu bewerten, sind ihre Ergebnisse ebenfalls in den Abbildungen 5.5 und 5.6 eingezeichnet. Insgesamt lässt sich feststellen, dass die REDIM nicht die Vorhersagegenauigkeit der SWQT erreicht, aber dieser deutlich näher als die FGM kommt. Betrachtet man die relativen Fehler hinsichtlich CO (siehe Abbildung 5.6), so erkennt man, dass diese für alle Positionen an der Wand am größten werden. Vergleicht man den relativen Fehler mit dem der FGM, beträgt dieser etwa ein Viertel an der Position (a), weniger als ein Achtel bei Position (b) und (c) und etwa ein Sechstel bei Position (d). Betrachtet man das Ergebnis der SWQT-Simulation, so erkennt man, dass ihr Fehler verschwindend gering ist, mit Ausnahme der wandnahen Region bei Position (a). Wie erwähnt, lässt sich vermuten, dass dort Interpolationsfehler sichtbar werden. Zunächst scheint die REDIM dort eine bessere Vorhersage als die SWQT zu leisten. Bei genauerer Betrachtung erkennt man jedoch, dass die REDIM von einer Fehlerkompensation profitiert. Zum einen enthält ihr Ergebnis einen Fehler hinsichtlich der Flammenposition und zum anderen ist die Form des CO-Profiles etwas schmaler (räumlich gestaucht). Die SWQT hingegen weist nur einen leichten Fehler in der Flammenposition auf.

Soweit zeigen die Ergebnisse, dass die Berücksichtigung approximierter Gradienten (und damit skalarer Dissipationsraten) im Rahmen des Tabellierungsprozesses signifikante Verbesserungen ermöglicht. Dies gilt insbesondere für Spezies, welche nur in geringen Konzentrationen auftreten, wie beispielsweise CO.

Nachfolgend werden einige Überlegungen hinsichtlich des REDIM-Ansatzes im Kontext des turbulenten Betriebspunktes des SWQ-Brenners dargelegt: Wie die Beiträge in Abbildung 5.3 und der Vergleich der Ergebnisse mit der SWQT-Simulation in den Abbildungen 5.5 und 5.6 zeigen, ist der verbleibende Fehler der REDIM auf die Ungenauigkeit der Abschätzung der skalaren Dissipationsrate zurückzuführen. Wie erwähnt, sind die Gradienten der HOQ-Konfiguration größer als jene, welche in der laminaren SWQ-Konfiguration zu finden sind. Eine Auswertung der Gradienten des Enthalpie- und des CO-Feldes ist in Abbildung 5.8 als Verhältnis zwischen dem HOQ- und dem SWQ-Szenario gezeigt. Während

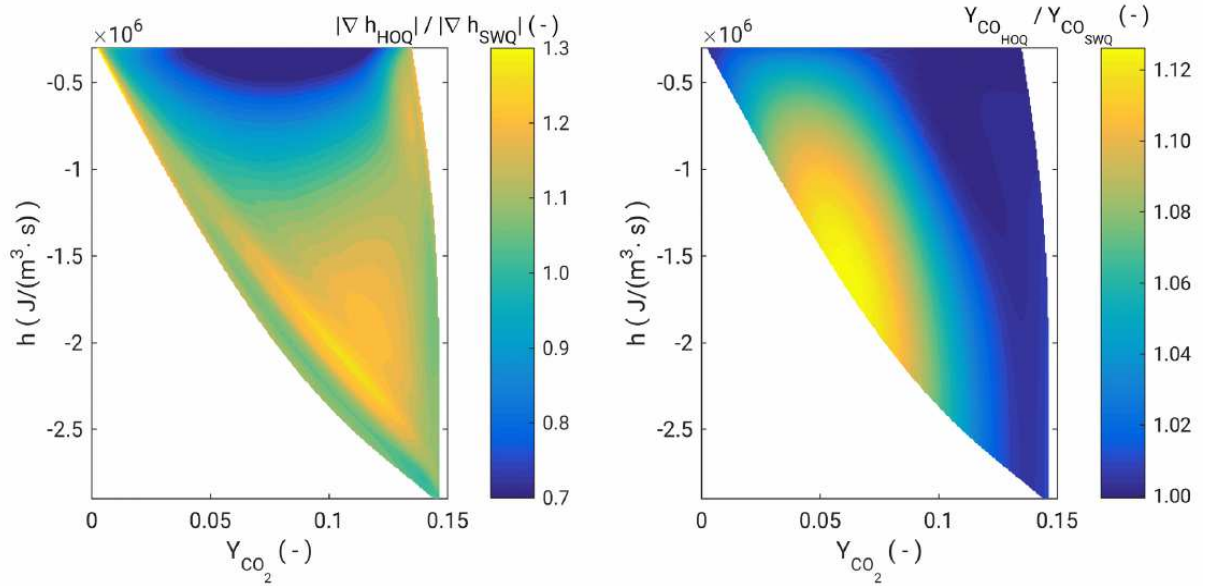


Abbildung 5.8: Gradienten des HOQ-Szenarios des Enthalpiefeldes (links) und des CO-Feldes (rechts), bezogen auf das laminare SWQ-Szenario für den gesamten Zustandsraum.

das maximale Verhältnis der Enthalpiegradienten leicht von der Wand entfernt zu finden ist ($\approx 1,3$), befindet sich das maximale Verhältnis der CO-Gradienten ($\approx 1,12$) direkt an der Wand. Weiterhin ist offensichtlich, dass es in turbulenten wandnahen Strömungen, wie sie in realen Systemen auftreten, zu Variationen dieser Gradienten kommt. Gruber et al. [33] beispielsweise beobachtete im Rahmen einer turbulenten SWQ-Konfiguration im Kontext von vorgemischten Wasserstoffflammen, dass dort temporär Wandwärmeflüsse von etwa 150 % bezogen auf den eindimensionalen HOQ-Referenzfall erreicht werden. Für die turbulente Betriebsweise des hier betrachteten SWQ-Brenners konnte [41] eine Erhöhung des maximalen Wandwärmeflusses von 70 % gegenüber der laminaren Betriebsweise feststellen. Diese Wärmeflüsse deuten auf ähnliche Variationen hinsichtlich der wandnahen Enthalpiegradienten hin, welche ihrerseits eine Variation der CO-Konzentration verursachen werden. Es ist zwar nicht möglich, diese Variationen auf Basis der hier gezeigten Daten vollständig zu quantifizieren, jedoch können einige Abschätzungen gemacht werden.

Die HOQ-Gradienten, welche für die REDIM-Tabelle genutzt werden, sind etwa 30 % größer als die Gradienten, welche in der laminaren SWQ-Simulation auftreten. Dies lässt sich in Abbildung 5.8 (links) nachvollziehen. Wie aus Abbildung 5.6 bei Position (b) und Abbildung 5.8 (rechts) hervorgeht, führt dies zu einer Überschätzung der CO-Konzentration

von etwa 12 %. Mit den Angaben zu den oben beschriebenen turbulenten Simulationen lässt sich abschätzen, dass die Gradienten der turbulenten SWQ-Simulation etwa 50 % größer und die Gradienten der laminaren SWQ-Simulation hingegen etwa 30 % kleiner als die Gradienten der eindimensionalen HOQ-Konfiguration sind. Das heißt, die Gradienten des HOQ-Szenarios liegen zwischen den beiden Betriebsweisen des SWQ-Brenners. Entsprechend führt dies bei einer Simulation auf Basis der REDIM-Tabelle zur Unterschätzung des Kohlenmonoxids, wenn es im turbulenten SWQ-Fall zu großen Enthalpiegradienten kommt. Eine Quantifizierung ist an dieser Stelle schwierig. Eine Abschätzung auf Basis der vorangehenden Überlegungen, führt jedoch auf einen Wert von 20 %, wobei zu erwartende nichtlineare Effekte ignoriert werden.

Hieraus lässt sich schließen, dass die Berücksichtigung realistischer skalarer Dissipationsraten auch für andere Situationen, wie beispielsweise das turbulente Flamme-Wand-Szenario, zu einer spürbaren Verbesserung der Ergebnisse führt.

Weiterhin kann eine Verbesserung durch die Hinzunahme weiterer Kontrollparameter erzielt werden. Wie Steinhilber und Maas [106] zeigen konnten, nehmen die Anforderungen an die Genauigkeit der Gradientenabschätzung ab, wenn die Zahl der Kontrollparameter steigt. Die praktische Implementierung gestaltet sich dabei jedoch zunehmend schwierig.

5.1.4 Zusammenfassung

Dieser Abschnitt behandelte die Modellierung der Flamme-Wand-Interaktion in Bezug auf die Vorhersage der CO-Konzentration und der Temperatur im Bereich des Flammenverlöschens. Hierfür wurden verschiedene Chemietabellierungsansätze anhand der laminaren SWQ-Konfiguration untersucht und bewertet. Die Analyse der FGM-Ergebnisse mithilfe der Speziestransportgleichung im Zustandsraum zeigte, dass ungeeignete Annahmen hinsichtlich der skalaren Dissipationsrate im Rahmen der FGM-Tabellenerzeugung zu einem systematischen Vorhersagedefizit führen. Dabei werden die skalaren Dissipationsraten durch die Verwendung von eindimensionalen Flammenrechnungen festgelegt, welche keine Enthalpiegradienten aufweisen. Diese haben, wie in den vorangehenden Darstellungen klar wurde, einen signifikanten Einfluss auf die CO-Verteilung in der betrachteten SWQ-Konfiguration. Weiterhin wurden die Ergebnisse einer Detaillierten-Chemie-Simulation der SWQ-Konfiguration zur Generierung einer Chemietabelle genutzt. Die Simulation mithilfe dieser Tabelle konnte die zugrunde liegende Detaillierte-Chemie-Rechnung nahezu perfekt reproduzieren, womit gezeigt werden konnte, dass eine korrekte Vorhersage der Konfiguration mit einer Chemietabelle auf Basis von zwei Kontrollvariablen grundsätzlich möglich ist. Eine Analyse dieser Simulation offenbarte, dass die skalaren Dissipationsraten hierbei exakt sind. Als eine Verbesserung gegenüber der FGM-Tabelle wurde schließlich die REDIM-Methode untersucht, welche die Gradienten einer eindimensionalen HOQ-Simulation zur Tabellenerzeugung nutzt. Sie führt damit zu einer deutlichen Reduktion des Tabellierungsaufwands gegenüber der direkten Tabellierung des SWQ-Ergebnisses der Detaillierten-Chemie-Rechnung (SWQT). Die gute Übereinstimmung des REDIM-Ergebnisses bei nur moderaten Abweichungen von dem Ergebnis der Detaillierten Chemie im Kontext der SWQ-Konfiguration stellt damit einen praktikablen Kompromiss dar.

5.2 Vorbetrachtungen zur Entwicklung des Tabellierungskonzeptes

Im vorangehenden Abschnitt wurde gezeigt, dass die Annahme von skalaren Dissipationsraten, welche der zu simulierenden Konfiguration ähnlich sind, zu besseren Simulationsergebnissen führt. Im Allgemeinen sind diese nicht bekannt. Aus diesem Grund liegt die Idee nahe, zusätzliche Dimensionen in das Konzept der Chemietabellierung einzuführen, welche eine Variation der skalaren Dissipationsraten berücksichtigt, sodass die Universalität der Tabelle erhöht wird. Betrachtet man Gleichung 5.3, so erkennt man, dass der chemische Zustand nicht nur von der Enthalpie und der Fortschrittsvariablen, sondern auch von den skalaren Dissipationsraten abhängt, wobei Letztere im Allgemeinen unbekannte Funktionen der Kontrollvariablen sind.

Im Folgenden wird geprüft, ob das Problem, welches sich daraus ergibt, dass die Verläufe der skalaren Dissipationsraten einer gegebenen Konfiguration unbekannt sind, damit gelöst werden kann, dass stattdessen konstante Verläufe der skalaren Dissipationsraten verwendet werden. Diese könnten hierbei sequenziell über den gesamten Wertebereich des realen Verlaufs der betrachteten Konfiguration variiert werden, wobei die sich jeweils ergebende Lösung zu tabellieren wäre.

Zur Überprüfung der Machbarkeit dieses Konzeptes wird die adiabate Flamme bei einer Frischgastemperatur von 300 K als Testfall verwendet. Aufgrund dessen, dass sich die Enthalpie im Rahmen dieses Testfalls nicht ändert, kann zunächst Gleichung 5.3 vereinfacht werden, indem anstelle von $Y_k = Y_k(Y_{\text{CO}_2}, h)$ lediglich eine Abhängigkeit des chemischen Zustands von der Fortschrittsvariablen entsprechend

$$Y_k = Y_k(Y_{\text{CO}_2}) \quad (5.5)$$

angenommen wird. Die Transportgleichung vereinfacht sich damit zu

$$0 = \chi_{\text{CO}_2} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Y_{\text{CO}_2}^2} + \dot{\omega}_k - \frac{\partial Y_k}{\partial Y_{\text{CO}_2}} \dot{\omega}_{\text{CO}_2}, \quad (5.6)$$

welche lediglich eine Dimension (Y_{CO_2}) und einen Parameter (χ_{CO_2}) enthält. Der reale Verlauf der skalaren Dissipationsrate χ_{CO_2} der adiabaten Flamme ist in Abbildung 5.9 (oben) dargestellt. Dieser Verlauf ist a priori unbekannt, sodass Gleichung 5.6 stattdessen mehrfach für jeweils einen konstanten Verlauf der skalaren Dissipationsrate gelöst wird. Dieser wird dabei über den gesamten Wertebereich (0 bis $5 \cdot 10^4$) variiert, sodass im Ergebnis der gesamte Y_{CO_2} - χ_{CO_2} -Raum abgedeckt wird. Das Tabellierungskonzept sieht dann einen Zugriff mittels der beiden Variablen Y_{CO_2} und χ_{CO_2} vor. Voraussetzung für das Gelingen ist, dass der chemische Zustand an einem Ort im Y_{CO_2} -Raum nur von dem lokalen χ_{CO_2} und nicht von dessen Verlauf über den gesamten Y_{CO_2} -Raum abhängt.

Nachfolgend wird zunächst das numerische Verfahren erläutert, welches zur Lösung der transformierten Transportgleichung entsprechend Gleichung 5.6 verwendet wird. Es folgt eine Ergebnissektion, in welcher das in diesem Abschnitt vorgestellte Tabellierungskonzept auf Basis von Zustandsraumlösungen bewertet wird. Das Kapitel endet schließlich mit der Festlegung des in dieser Arbeit verfolgten Tabellierungskonzeptes.

5.2.1 Numerisches Lösen der transformierten Speziestransportgleichung

Zur numerischen Lösung von Gleichung 5.6 wird im Rahmen dieser Arbeit ein eindimensionaler Finite-Differenzen-Löser in ein eigenständiges FORTRAN-Programm implementiert. Die räumliche Diskretisierung wird mit einem äquidistanten Gitter realisiert, wobei die Differenzenquotienten von 2. Ordnung genutzt werden. Die Gleichung wird mithilfe eines Pseudo-Zeitschrittverfahrens auf Basis der expliziten Euler-Methode mit einer dynamischen Zeitschrittweite gelöst. Hierbei wird die rechte Seite von Gleichung 5.6 einer zeitlichen Änderung des Zustands gleichgesetzt und eine Zeitintegration durchgeführt. Die Zeitschrittweite wird so geregelt, dass eine Diffusionszahl von 0,3 angestrebt wird. Die Diffusionszahl, welche für die Regelvorschrift entsprechend Gleichung 2.64 benötigt wird, ist mit

$$\mathcal{D} = \max_{Y_{\text{CO}_2}} \left(\frac{\chi_{\text{CO}_2} \cdot \Delta t}{\rho \cdot (\Delta Y_{\text{CO}_2})^2} \right) \quad (5.7)$$

gegeben. Die chemischen Quellterme werden innerhalb eines Zeitschritts als entkoppeltes nulldimensionales System betrachtet und mit dem impliziten Löser *LSode* [89] gelöst. Die Kopplung mit der Transportgleichung findet schließlich über den Quelltermverlauf des impliziten Verfahrens statt, welcher hierzu über das Zeitintervall eines expliziten Zeitschritts gemittelt wird.

Die Quellterme und Diffusionskoeffizienten werden entsprechend der Beschreibung in Abschnitt 3.2 berechnet, wobei für das nachfolgende Beispiel der Smooke-Mechanismus genutzt wird. Die Flamme wird im CO_2 -Raum mit 51 Punkten aufgelöst, die dynamische Zeitschrittweite liegt im Bereich von 10^{-7} s. Es wird für alle Spezies eine Transportgleichung gelöst, wobei sich die rechte Seite von Gleichung 5.6 für CO_2 stets null ergibt und damit die Konsistenz des Lösertests bestätigt. Somit ist auch das numerische Gitter im Y_{CO_2} -Raum zeitunabhängig. Die Lösung des Pseudo-Zeitschrittverfahrens wird erreicht, wenn die Lösung stationär geworden ist. Für die Anfangslösung wird ein linearer Verlauf zwischen dem Frischgaszustand bei $Y_{\text{CO}_2} = 0$ und dem Gleichgewichtszustand bei $Y_{\text{CO}_2} = Y_{\text{CO}_2, \text{max}}$ einer freien Flamme angenommen, welcher für einige Spezies in Abbildung 5.9 (Mitte) dargestellt ist. An den Rändern wird die zeitliche Änderung des Zustands zu null gesetzt, sodass die Bedingungen der freien Flamme erhalten bleiben.

5.2.2 Ergebnisse und Schlussfolgerungen für die Entwicklung des Tabellierungskonzepts

Für die beiden in Abbildung 5.9 (oben) dargestellten Annahmen hinsichtlich der skalaren Dissipationsrate ergeben sich die stationären Verläufe in Abbildung 5.9 (unten). Für den konstanten Verlauf der skalaren Dissipationsrate wird hierbei der über den Y_{CO_2} -Raum gemittelte Wert des realen Verlaufs verwendet. In einem Vergleich beider Lösungen mit den Speziesverläufen der adiabaten Flamme zeigt sich, dass diese unter Annahme der korrekten skalaren Dissipationsrate reproduziert werden. Unter Annahme einer konstanten skalaren Dissipationsrate ist dies nicht der Fall. Wie anhand der Speziesverläufe in Abbildung 5.9 (unten) zu erkennen ist, führt die Annahme einer konstanten skalaren Dissipationsrate zu glatteren Profilen, also solchen, die näher an der Startlösung liegen.

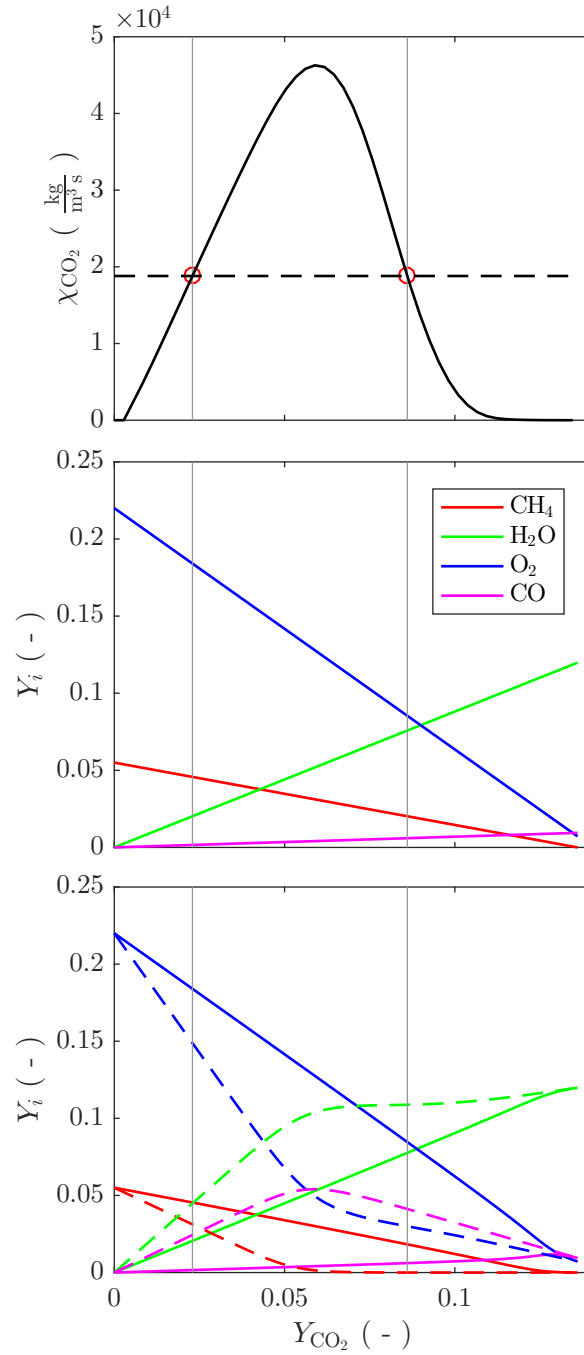


Abbildung 5.9: Oben: Skalare Dissipationsrate der adiabaten Flamme (durchgezogenen Linie) sowie ein fiktiver konstanter Verlauf der skalaren Dissipationsrate (gestrichelt). Mitte: Startlösung zur Lösung der Gleichung 5.6 im Rahmen des Pseudo-Zeitschrittverfahrens anhand einiger Spezies. Unten: Stationäre Lösung von Gleichung 5.6 unter Annahme der skalaren Dissipationsrate der adiabaten Flamme (durchgezogene Linie) sowie unter Annahme des konstanten Verlaufs (gestrichelt).

Besonders interessant sind dabei die Stellen (vertikale Linien in Abbildung 5.9), bei welchen die skalaren Dissipationsraten der beiden Lösungen übereinstimmen (rote Kreise in Abbildung 5.9 (oben)). Auch dort ist eine Abweichung der beiden Lösungen zu erkennen, womit die Voraussetzung für das oben beschriebene Tabellierungskonzept widerlegt werden: Der chemische Zustand an einem Ort im Y_{CO_2} -Raum hängt nicht nur vom lokalen χ_{CO_2} , sondern auch von dessen Verlauf im Y_{CO_2} -Raum ab. Damit wird klar, dass selbst die Hinzunahme aller auftretender skalarer Dissipationsraten (χ_{CO_2} , $\chi_{h,Y_{\text{CO}_2}}$, χ_h) aus Gleichung 5.3 als Tabellenparameter, jeweils in Form einer sequenziellen Variation, nicht zu einer universellen Chemietabelle führen wird.

Die in Abbildung 5.9 (unten) gezeigten Abweichungen lassen sich zwar durch realistischere Verläufe der skalaren Dissipationsraten reduzieren, jedoch würden diese immer aus Lösungen im physikalischen Raum abgeleitet werden müssen, was den Nutzen des Lösens im Zustandsraum deutlich einschränkt. Aus diesem Grund wird im nachfolgenden Abschnitt die Tabellenerzeugung basierend auf Lösungen im physikalischen Raum fokussiert. Dort verlagert sich das Problem auf das Finden von geeigneten Erzeugungskonfigurationen, wohingegen die skalaren Dissipationsraten zu diesen inhärent korrekt sind. Eine universelle Tabelle kann offensichtlich auch damit nicht erzeugt werden. Jedoch lässt sich eine Tabelle generieren, die exakte Ergebnisse ermöglicht, wenn die zu simulierende Konfiguration mit einer der Erzeugungskonfigurationen übereinstimmt, wie in Abschnitt 5.3 gezeigt wird. Des Weiteren lassen sich gute Approximationen für ein breites Spektrum von Anwendungen erzielen, wenn die skalaren Dissipationsraten der zu simulierenden Konfiguration im Raum der skalaren Dissipationsraten der Erzeugungskonfiguration enthalten sind. Mögliche Erzeugungskonfigurationen sind beispielsweise die HOQ-Konfiguration, die Burner-stabilized-Flame (BSF)-Konfiguration und die EGR-Konfiguration. Wie in Abschnitt 5.1.3.1 gezeigt wurde, kann auch die SWQ-Konfiguration zur Tabellenerzeugung genutzt werden. Jede Erzeugungskonfiguration ermöglicht eine Tabelle, welche jeweils in der Lage ist, sich im Rahmen einer Simulation selbst zu reproduzieren. Die BSF-Konfiguration, welche bei der FGM-Tabelle verwendet wird, sowie die EGR-Konfiguration berücksichtigen keine Enthalpiegradienten. Diese Annahme führt, wie zuvor gezeigt, zu Abweichungen bei der Simulation der SWQ-Konfiguration, welche von Enthalpiegradienten geprägt ist. Eine Tabelle, welche lediglich auf HOQ-Gradienten basiert, wie beispielsweise die REDIM-Tabelle, liefert zwar bessere Ergebnisse, führt aber aufgrund der Überschätzung der Enthalpiegradienten ebenfalls zu Abweichungen. Um eine universelle Tabelle zu ermöglichen, wird im nachfolgenden Abschnitt ein Tabellierungskonzept beschrieben, bei welchem eine Kombination der HOQ-Konfiguration mit der EGR-Konfiguration verwendet wird. Bei FWI-Simulationen, wird dann lediglich jener Teil der Tabelle genutzt, welcher für die betrachtete Konfiguration hinsichtlich der auftretenden Enthalpiegradienten ähnlich ist.

5.3 Entwicklung der dreidimensionalen HOQEGR-Chemie-Tabelle

Dieser Abschnitt beschreibt die Entwicklung der Head-on-quenching-exhaust-gas-recirculation (HOQEGR)-Tabelle zur Simulation wandnaher Verbrennung. Die Tabelle stellt eine Er-

weiterung der in Abschnitt 3.3 beschriebenen FGM-Tabelle dar, welche am Fachgebiet Energie- und Kraftwerkstechnik entwickelt und etabliert wurde und die Kontrollvariablen Y_{CO_2} und Enthalpie h verwendet. Durch die Hinzunahme einer weiteren Kontrollvariablen soll die Tabelle neben den Vorhersagefähigkeiten der FGM-Tabelle eine Erweiterung der Leistungsfähigkeit hinsichtlich der Simulation von FWI-Szenarien erreichen.

Im ersten Unterabschnitt werden zunächst die Erkenntnisse der vorangehenden Kapitel zusammengetragen und entsprechende Merkmale für die Entwicklung der neuen Chemietabelle abgeleitet. Weiterhin wird die Findung der zusätzlichen Kontrollvariablen dargelegt. In einem weiteren Abschnitt wird die konkrete Umsetzung des Tabellierungskonzeptes beschrieben, welche den Implementierungen, die in dieser Arbeit geleistet wurden, zugrunde liegt. In Abschnitt 5.3.3 ist die Verifikation der Tabelle anhand generischer Konfigurationen dargelegt. Schließlich folgt in Abschnitt 5.3.4 die Anwendung der neuen Chemietabelle auf die SWQ-Konfiguration. Dort wird eine Bewertung im Kontext alternativer Tabellen vorgenommen und eine Analyse der verbesserten Resultate beschrieben.

5.3.1 Konzeptionierung

5.3.1.1 Zusammenfassung bisheriger Erkenntnisse und Zielsetzung im Hinblick auf die Tabellenentwicklung

Wie in Kapitel 4 festgestellt wurde, ist der FGM-Ansatz in der Lage, adiabate Flammen mit hoher Genauigkeit sowohl hinsichtlich der Flammenstruktur als auch hinsichtlich Spezies geringer Konzentration vorherzusagen. Im Kontext der (FWI) ist festzustellen, dass der Ansatz in der Region des Flammenverlöschens eine hohe Genauigkeit hinsichtlich der globalen Flammgeometrie und des Flammenkontaktpunktes aufweist. Es wurden weiterhin gute Vorhersagen der Flammenstruktur hinsichtlich der Temperatur- und der CO_2 -Profile erzielt. Hinsichtlich unverbrannter Kohlenwasserstoff sowie CO wurden jedoch große Abweichungen sichtbar. In Abschnitt 5.1 konnte die Ursache des Defizits im Rahmen der FGM-Tabellenerzeugung geklärt werden. Hierbei wurde die Bedeutung der skalaren Dissipationsraten beschrieben, für welche im Fall der FGM-Tabelle unphysikalische Annahmen in die Tabellierung einbezogen wurden. Eine deutliche Verbesserung stellte die REDIM-Methode dar, bei welcher die skalaren Dissipationsraten explizit vorgegeben werden können. Diese sind in der Regel unbekannt und müssen beispielsweise aus Simulationen im physikalischen Raum abgeschätzt werden, welche der zu simulierenden Konfiguration ähnlich sind. Die Vorhersagegenauigkeit der REDIM-Simulation steigt dabei mit der Qualität der Abschätzung. Genauere Abschätzungen der skalaren Dissipationsraten gehen jedoch in der Regel auch mit einem höheren Rechenaufwand der Simulationen im physikalischen Raum einher. Um die Problematik der unbekannten skalaren Dissipationsraten zu umgehen, wurde in Abschnitt 5.2 eine Machbarkeitsstudie für ein alternatives Tabellierungskonzept vorgestellt. Hierbei wurde festgestellt, dass die direkte Einführung von skalaren Dissipationsraten als Kontrollvariablen nicht zu einer universellen Chemietabelle führen, da sie nicht als unabhängige Variablen des Problems betrachtet werden dürfen. Stattdessen könnten skalare Dissipationsraten als parametrisierte Funktionen der Kontrollvariablen Y_{CO_2} und h formuliert werden, wobei die hierbei eingeführten Parameter als zusätzliche Zugriffsparameter der Chemietabelle verwendet werden. Die

Wahl dieser Funktionen würde jedoch ihrerseits Vorkenntnisse der zu simulierenden Konfiguration erforderlich machen und damit einen entsprechenden Rechenaufwand mit sich bringen.

Ein weiterer Ansatz zur Bestimmung der Gradienten, welche beim Lösen der Transportgleichung im Zustandsraum erforderlich sind, ist das Lösen zusätzlicher Gleichungen für die Gradienten der Kontrollvariablen. Hierdurch wird der Informationsverlust hinsichtlich der räumlichen Gradienten, welcher die Transformation der Speziestransportgleichung in den Zustandsraum mit sich bringt, kompensiert. Ein solches Konzept wurde von Scholtissek et al. [97] für frei propagierende Flammen beschrieben, bei welchem die zu lösenden Gradienten im Wesentlichen durch Eigenschaften der Verbrennungschemie selbst bestimmt werden. Eine Erweiterung dieses Konzeptes für wandnahe Verbrennung, bei welchem die Gradienten weniger durch die Verbrennungschemie als durch die Randbedingungen der Konfiguration bestimmt werden, wurde an dieser Stelle ausgeklammert.

In dieser Arbeit wird stattdessen ein Konzept entwickelt, welches auf Detaillierten-Chemie-Rechnungen im physikalischen Raum beruht. Dabei werden die skalaren Dissipationsraten, wie bei der FGM-Tabellenerzeugung, implizit über die Randbedingungen der Konfiguration festgelegt, welche zur Erzeugung der Chemietabelle genutzt werden. Durch die sequenzielle Variation der Randbedingungen und das Einführen einer zusätzlichen Kontrollvariablen sollen damit die Genauigkeit gegenüber der FGM-Tabelle sowie gegenüber der REDIM für verschiedene Konfigurationen verbessert werden, ohne dabei auf konfigurationsspezifische Gradientenabschätzungen angewiesen zu sein. Ein wichtiger Testfall für die neue Chemietabelle ist mit der SWQ-Konfiguration gegeben.

5.3.1.2 Festlegung der Erzeugungskonfigurationen

In Anlehnung an die FGM-Tabellenerzeugung und auch, um die Anzahl der beschreibenden Parameter gering zu halten, werden zur Erzeugung der neuen Tabelle eindimensionale Detaillierte-Chemie-Rechnungen genutzt. Da der chemische Zustand bei der FWI von Enthalpiegradienten geprägt ist, wird das eindimensionale HOQ-Szenario als Ausgangspunkt für die Tabellierung gewählt. Wie schon zuvor erwähnt, weist die HOQ-Konfiguration im Vergleich mit der SWQ-Konfiguration 30 % steilere Enthalpiegradienten auf. Um hinsichtlich dieser Gradienten Zustände zu erzeugen, die den Zuständen des SWQ-Szenarios ähnlich sind, wird das HOQ-Szenario um den EGR (exhaust gas recirculation)-Parameter erweitert, welcher eine Verringerung der Enthalpiegradienten ermöglicht. Hierbei wird dem Frischgas kaltes Abgas beigefügt, sodass sich eine dickere Flamme einstellt und der Verlöschabstand größer wird. Die Abgaszusammensetzung wird hierbei als Lösung des chemischen Gleichgewichts für ein stöchiometrisches Methan-Luft-Gemisch bei einer Temperatur von 300 K erhalten. Der egr-Wert lässt sich mit

$$Y_{k,\text{EGR}} = (1 - \text{egr}) \cdot Y_{k,\text{p.fr.}} + (\text{egr}) \cdot Y_{k,\text{p.ex.}} \quad (5.8)$$

definieren. Hierbei bezeichnen $Y_{k,\text{p.fr.}}$ die Zusammensetzung des reinen Frischgases, $Y_{k,\text{p.ex.}}$ die Abgaszusammensetzung und $Y_{k,\text{EGR}}$ die Zusammensetzung des Frischgases mit Abgasbeimengung. Weiterhin soll die Chemietabelle FWI-Situationen mit vergleichsweise steilen Enthalpiegradienten beschreiben können, wie diese beispielsweise bei der turbulenten Betriebsweise des SWQ-Brenners auftreten. Um steile Gradienten im Rahmen von

HOQ-Simulationen zu erzielen, werden die Frischgastemperatur und die Wandtemperatur erhöht. Es entstehen dünnere Flammen, und es kommt zu geringeren Verlöschabständen. Wie später in Abschnitt 5.3.4.2 deutlich werden wird, ist die Hinzunahme von Zuständen, die durch steilere Gradienten geprägt sind, bereits für die Simulation des laminaren SWQ-Szenarios bedeutend.

Nachfolgend wird die beschriebene Erzeugungskonfiguration bewertet. Abbildung 5.10 zeigt die Entwicklung des Enthalpiegradienten des eindimensionalen HOQ-Szenarios an einem Wandabstand, der durch eine Temperatur von 1000 K definiert ist. Dieser Temperaturwert ermöglicht dabei die Erfassung des Gradienten nahe der reaktiven Zone der Flammen, deren korrekte Beschreibung signifikant ist. Durch seine Definition bewegt sich der betrachtete Wandabstand im Verlauf des Flammenverlöschens auf die Wand zu und in der Abkühlphase wieder von ihr weg. Die zeitliche Entwicklung ist dabei über den mit der Zeit monoton zunehmenden CO_2 -Massenbruch am betrachteten Wandabstand aufgetragen. Der in Abbildung 5.10 (links) als schwarze dünne Linie eingezeichnete Verlauf

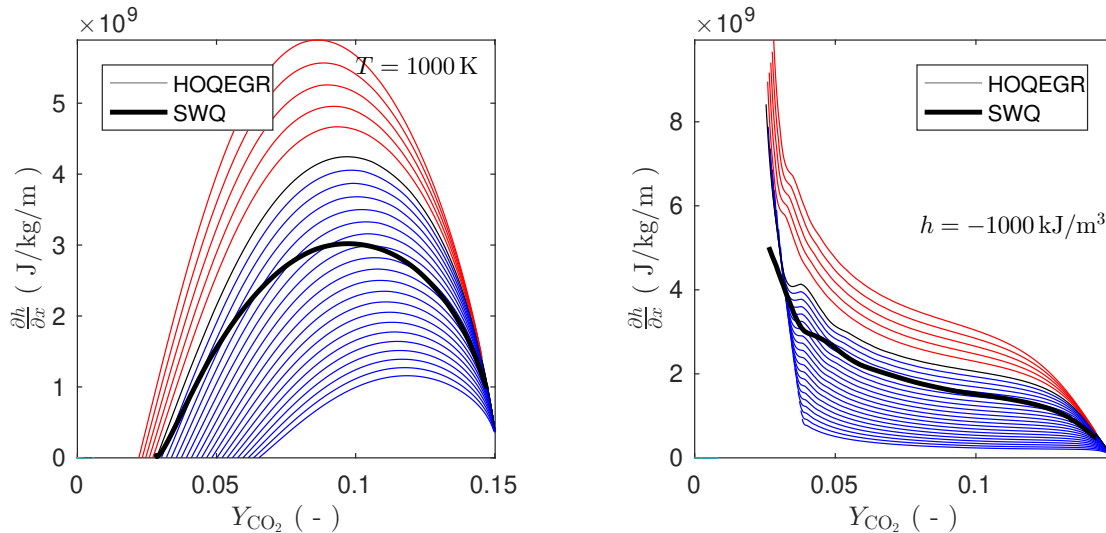


Abbildung 5.10: Enthalpiegradienten beim HOQ-Szenario für vorgewärmte (rot) und mit kaltem Abgas verdünnte (blau) Frischgasbedingungen sowie für den Fall ohne Vorwärmung und Verdünnung (schwarze dünne Linie). Die Verläufe zeigen die Gradienten bei einem zeitabhängigen Wandabstand, welcher durch eine Temperatur von 1000 K definiert ist. Die schwarze Linie (fett) zeigt den Enthalpiegradienten innerhalb der SWQ-Konfiguration entlang der Temperaturisolinie von 1000 K (links) bzw. entlang einer Enthalpiesolinie von -1000 kJ/m^3 (rechts).

entspricht dem Verlauf des Enthalpiegradienten für den Ausgangsfall des HOQ-Szenarios, d. h. ohne Abgasrezirkulation und bei einer Frischgas- und Wandtemperatur von 300 K. Wie zu sehen ist, wird ein maximaler Gradient von etwas mehr als $4 \cdot 10^9 \text{ J/(kg m)}$ erreicht. Die roten Linien zeigen analog die Verläufe des Gradienten für die Fälle mit vorgewärmtem Frischgas. Eingezeichnet sind die Verläufe für Vorwärmtemperaturen (pht-Werte) von 325, 350, 375, 400 und 425 K. Bei einer Vorwärmtemperatur von 425 K wird ein maximaler Gradient von etwa $6 \cdot 10^9 \text{ J/(kg m)}$ erreicht. Zur Reduktion der Gradienten wird dem Frischgas kaltes Abgas beigefügt. Die gezeigten Linien in blau entsprechen den Abgasanteilen (egr-

Werte), welche in 1 %-Schritten auf 20 % gesteigert werden. Bei 20 % Abgas wird noch ein maximaler Gradient von etwas mehr als 10^9 J/(kg m) erreicht. Um die Universalität der so erzeugten Datengrundlage zu zeigen, ist zusätzlich der Gradient der laminaren SWQ-Konfiguration als dicke schwarze Linie eingezeichnet. Sie entspricht dem Verlauf entlang der 1000-K-Isolinie. Wie zu sehen ist, wird dieser Verlauf vollständig von dem durch die HOQ-Simulationen aufgespannten Gebiet abgedeckt. Abbildung 5.10 (rechts) zeigt analog den Verlauf des Gradienten für eine konstante Enthalpie von -1000 kJ/m³. Es ist zu erkennen, dass der Enthalpiegradient der SWQ-Simulation für kleine Y_{CO_2} -Werte nicht von den Gradienten der HOQ-Simulation abgedeckt wird. Dies offenbart, dass eine Tabelle auf Basis der gezeigten HOQ-Serie, welche den Gradient der Enthalpie selbst als Kontrollvariable nutzen würde (zusätzlich zu Y_{CO_2} und h), nicht den gesamten Zustandsraum, der im Rahmen der SWQ-Simulation auftritt, füllen könnte und damit eine Extrapolation der Zustände erforderlich machen würde. Wie nachfolgend gezeigt wird, führt nicht jede Wahl der Kontrollvariablen zu diesem Erfordernis. Insgesamt lässt sich aus den Darstellungen feststellen, dass die in der laminaren SWQ-Konfiguration auftretenden Enthalpiegradienten größtenteils innerhalb des Bereichs der HOQEGR-Konfigurationen enthalten ist, sodass diese als Erzeugungskonfiguration genutzt werden können.

5.3.1.3 Auswahl der Kontrollvariablen

Zur Auswahl einer geeigneten Kontrollvariablen werden nachfolgende Überlegungen berücksichtigt.

1. Im Rahmen einer Machbarkeitsstudie wurde der Enthalpiegradient direkt als zusätzliche Kontrollvariable zur Erweiterung der FGM-Tabelle eingeführt. Dieser lässt sich während der Simulation aus dem Enthalpiefeld berechnen, sodass keine zusätzliche Transportgleichung gelöst werden muss. Es stellte sich jedoch heraus, dass das Konzept numerisch instabil ist. Da zur Ermittlung der Enthalpierandbedingung der Gradient der Enthalpie selbst genutzt werden müsste, ergibt sich eine direkte Rückkopplung der beiden Größen. Die daraus resultierende Anfachung von Ungenauigkeiten führte zur Aufgabe des Konzeptes der direkten Nutzung des Enthalpiegradienten als Zugriffsparameter. Dennoch lässt sich daraus die Erkenntnis ableiten, dass ein Konzept, welches das Lösen einer zusätzlichen Transportgleichung vorsieht, einen positiven Effekt auf die Stabilität des Gesamtverfahrens hat. Dies ist zum einen auf die Entkopplung der Enthalpierandbedingung von ihrem Gradienten als auch auf die Wirkung der Diffusion zurückzuführen, die mit dem Transport der Variablen einhergeht und numerische Ungenauigkeiten dämpft.
2. Entsprechend des ersten Punktes wird im Folgenden ein Konzept entwickelt, welches den Transport einer zusätzlichen Kontrollvariablen vorsieht. Voraussetzung für das Lösen einer solchen Transportgleichung ist, dass sowohl Randbedingungen als auch Transporteigenschaften und Quellterme der Variablen bekannt sind. Dies ist beispielsweise für jede Linearkombination von Speziesmassenbrüchen der Fall.
3. Da im Kontext der FGM-Tabelle die Kontrollvariablen Y_{CO_2} und h etabliert wurden und diese im Kontext der Flamme-Wand-Interaktion gute Ergebnisse hinsichtlich der Flammenstruktur hervorbrachten, werden diese beibehalten und lediglich um

eine weitere Kontrollvariable ergänzt. Für die Eindeutigkeit der Tabelle ergibt sich somit eine Monotoniebedingung für die zusätzliche Kontrollvariable entlang konstanter Enthalpie und konstantem CO_2 -Massenbruch. Diese Monotoniebedingung muss hierbei für den gesamten Y_{CO_2} - h -Raum erfüllt werden.

4. Weiterhin muss die Kontrollvariable bei konstanter Enthalpie und konstantem CO_2 -Massenbruch sensibel gegenüber Variationen des Enthalpiegradienten sein. Dies ermöglicht die Abbildung der Variation des chemischen Zustands zwischen verschiedenen Konfigurationen, welche sich hinsichtlich der Enthalpiegradienten unterscheiden. Des Weiteren sollte die Variation der Kontrollvariable im Rahmen der angestrebten Simulationen durch die Erzeugungskonfigurationen abgedeckt werden. Wie in Abbildung 5.10 (rechts) zu sehen ist und zuvor erwähnt wurde, ist dies beispielsweise nicht der Fall, wenn der Enthalpiegradient als Kontrollvariable genutzt werden würde.
5. Eine schärfere Anforderung an die zu wählende Kontrollvariable besteht in der konfigurationsübergreifenden Eindeutigkeit, die nur näherungsweise erreicht werden kann. Dies meint, dass feste Werte der drei Kontrollvariablen für verschiedene Konfigurationen zu möglichst ähnlichen chemischen Zuständen führen.

Punkt 5 stellt dabei eine besondere Herausforderung dar, welche in einem mathematischen Optimierungsproblem mündet. Aufgrund der Komplexität der Implementierung und Lösung dieses Optimierungsproblems wird im Rahmen dieser Arbeit auf ein solches systematisches Verfahren verzichtet. Dennoch wird das theoretische Konzept des Optimierungsproblems im Anhang B skizziert. Im Verlauf der Entwicklung der Chemietabelle zeigte sich, dass der CO -Massenbruch als Kontrollvariable bereits die Punkte (1) bis (4) erfüllt. Hinsichtlich Punkt (4) ist in Abbildung 5.11 zu sehen, dass für den CO -Massenbruch als Kontrollvariable eine vollständige Abdeckung des Zustandsraums, bei einer Temperatur von 1000 K (links) bzw. einer Enthalpie von -1000 kJ/m^3 (rechts), durch die Erzeugungskonfiguration erreicht wird. Dies ist eine notwendige, aber nicht hinreichende Voraussetzung für ein Tabellierungskonzept, welches ohne Extrapolation von chemischen Zuständen auskommt. Aufgrund abweichender Quellterme zwischen Erzeugungskonfiguration und zu simulierender Konfiguration kann damit nicht ausgeschlossen werden, dass in der Simulation Zuständen auftreten, welche sich außerhalb der Tabelle befinden.

5.3.2 Tabellenerzeugung

Dieser Abschnitt beschreibt die konkrete Umsetzung der Tabellenerzeugung, welche sich zum einen in die Berechnung von chemischen Zuständen anhand eindimensionaler Flammenrechnungen und zum anderen in die Projektion der erhaltenen Zustände auf die Kontrollvariablen aufteilt.

5.3.2.1 Erzeugung chemischer Zustände

Zur Erzeugung der Datengrundlage werden zunächst frei propagierende Flammen mithilfe der Detaillierten Chemie berechnet. Da der Fokus auf der Konzeptprüfung liegt

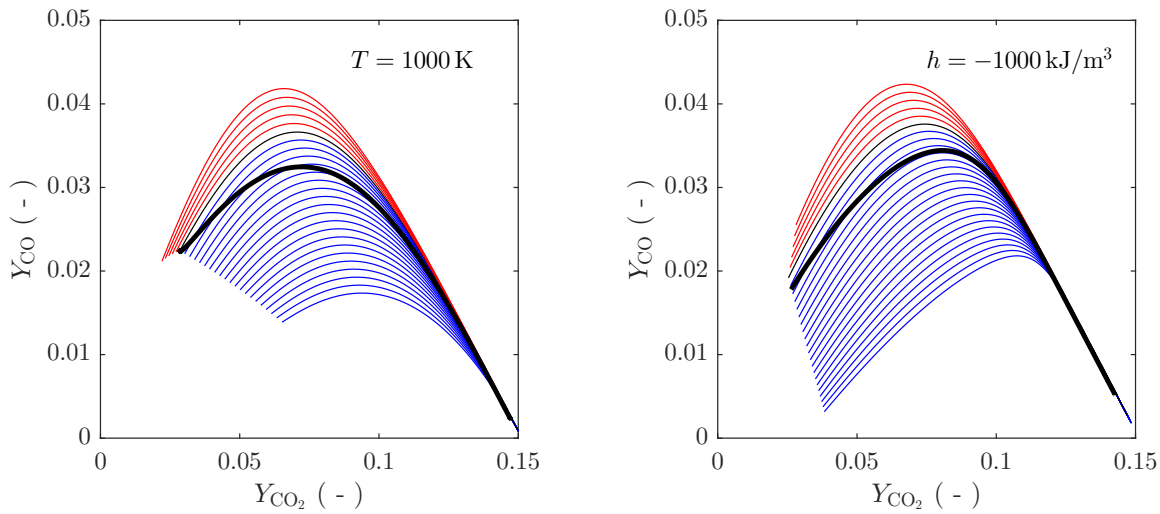


Abbildung 5.11: CO-Verläufe beim HOQ-Szenario für vorgewärmte (rot) und mit kaltem Abgas verdünnte (blau) Frischgasbedingungen sowie für den Fall ohne Vorwärmung und Verdünnung (schwarze dünne Linie). Die Verläufe zeigen den CO-Verlauf bei einem zeitabhängigen Wandabstand, welcher durch eine Temperatur von 1000 K definiert ist. Die schwarze Linie (fett) zeigt den CO-Verlauf innerhalb der SWQ-Konfiguration entlang der Temperaturisolinie von 1000 K (links) bzw. entlang einer Enthalpieisolinie von -1000 kJ/m^3 (rechts).

und die Genauigkeit der Reaktionskinetik nachrangig ist, wird hierbei der vergleichsweise kleine Chemiemechanismus von Smooke und die Annahme $\text{Lewis} = 1$ verwendet. Wie bereits erwähnt, beschränkt sich die Tabelle auf homogene stöchiometrische Methan-Luft-Mischungen. Die frei propagierenden Flammen haben jeweils einen konstanten Enthalpieverlauf über die Flamme hinweg, wobei das Enthalpieniveau von Flamme zu Flamme variiert wird. Durch die Beimengung von kaltem (stöchiometrischen) Abgas in die unverbrannte stöchiometrische Mischung wird das Enthalpieniveau linear mit dem Abgasanteil abgesenkt, wobei die Frischgastemperatur von 300 K unverändert bleibt. Es werden auf diese Weise 20 frei propagierende Flammen berechnet, deren Frischgas jeweils einen Prozentpunkt höheren Abgasanteil enthält. Hierbei werden die Flammen entsprechend ihres Abgasanteils indiziert, sodass eine Exhaust-gas-recirculation-Koordinate (egr-Koordinate) aufgespannt wird. Zur Erzeugung von Flammen mit höherem Enthalpieniveau wird das Frischgas vorgewärmt, wobei diesem kein Abgas beigefügt wird. Hierbei werden fünf Flammen mit jeweils 25 K höherer Frischgastemperatur berechnet. Hierbei wird die Preheating-temperature-Koordinate (pht-Koordinate) aufgespannt. Abbildung 5.12 (links) zeigt die frei propagierenden Flammen im Y_{CO_2} - h -Raum, wobei die rot gefärbten Verläufe den vorgewärmten Flammen und die blau gefärbten Verläufe den Flammen mit Abgasrückführung entsprechen. Der schwarze Verlauf entspricht der Flamme ohne Vorwärmung und ohne Abgasbeimengung. Abbildung 5.12 (rechts) zeigt den zugehörigen Quellterm von CO_2 als Farbverlauf über den von den eindimensionalen Flammenrechnungen aufgespannten Zustandsraum. Für den Bereich der vorgewärmten Flammen ergibt sich eine mit der FGM identische Quelltermverteilung, da dort identische Flammenrechnungen genutzt werden. Im Bereich der mit Abgas verdünnten Flammen unterscheidet sich der Quelltermverlauf

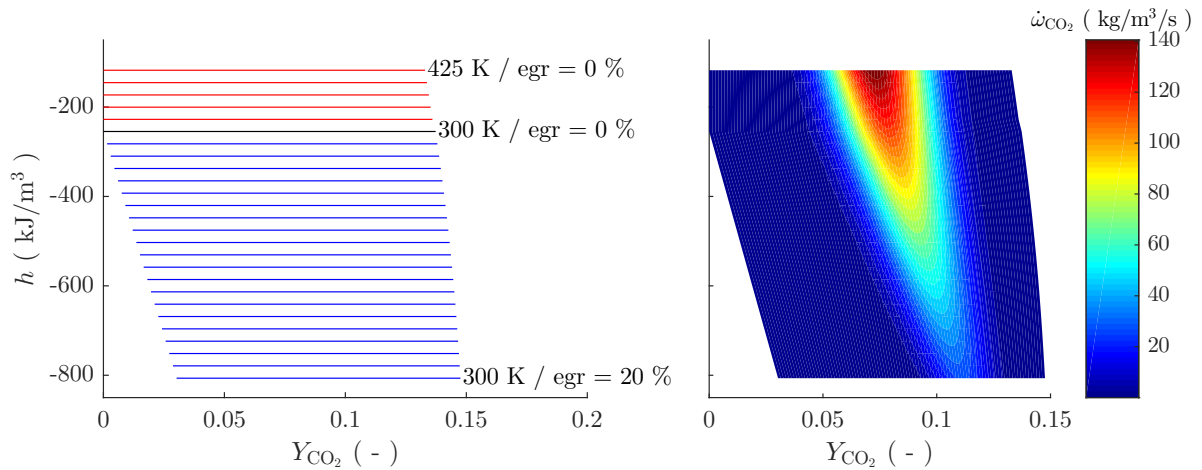


Abbildung 5.12: Frei propagierende Flammen im Y_{CO_2} - h -Raum für vorgewärmte (rot) und mit Abgas verdünnte (blau) Frischgasbedingungen (links) und die entsprechende CO_2 -Quelltermverteilung (rechts).

geringfügig von dem der FGM-Tabelle, da dort im Kontext der FGM, wie in Abschnitt 3.3 beschrieben, eine andersartige Konfiguration (brennerstabilisierte Flammen) genutzt werden. Aufgrund der konstanten Enthalpieverläufe der einzelnen Flammen, welche beiden Konfigurationen zugrunde liegt, ist jedoch auch im diesem Tabellenbereich eine hohe Übereinstimmung zwischen der FGM-Tabelle auf der einen Seite und der hier beschriebenen Chemietabelle auf der anderen Seite festzustellen.

Um den zunächst zweidimensionalen Zustandsraum um eine zusätzliche Dimension zu erweitern, wird jede der frei propagierenden Flammen als Startlösung für eine eindimensionale HOQ-Simulation genutzt. Dabei wird jeweils eine Wandtemperatur genutzt, welche der Frischgastemperatur der zugehörigen frei propagierenden Flamme entspricht. Die Initialisierung der Flammen wird derart vorgenommen, dass die Flamme zunächst von der Wand unbeeinflusst ist. Das instationäre eindimensionale Flammenverlöschen ist beispielhaft für den Fall ohne Abgasbeimengung und ohne Frischgasvorwärmung in Abbildung 5.13 (links) im Zeit-Orts-Raum anhand der Temperaturverteilung dargestellt, wobei die Wand durch eine konstante Temperatur von 300 K gekennzeichnet ist. Anhand der ebenfalls eingezeichneten CO_2 -Isolinien, ist der zeitliche Anstieg von CO_2 entlang der Wand zu erkennen. Abbildung 5.13 (rechts) zeigt analog einige der HOQ-Simulationen im Zeit-Orts-Raum, welcher zur Verdeutlichung der dreidimensionalen Ausdehnung des entstehenden Zustandsvolumens, um die egr/pht -Koordinate erweitert ist.

Zur Simulation der HOQ-Serie wird der FASTEST-Code verwendet, wobei ein äquidistantes Gitter genutzt wird. Die Gitterweite beträgt bei den EGR-Flammen $25 \mu\text{m}$ und bei den vorgewärmten Flammen $12,5 \mu\text{m}$. Beide Gitter enthalten 2000 Zellen. Die Randbedingungen entsprechen den in Abschnitt 4.3 vorgestellten Simulationen. Während der Simulation wird der Zeitschritt entsprechend Gleichung 2.63 so geregelt, dass sich eine Diffusionszahl von etwa 0,6 einstellt.

Die Speicherung der berechneten chemischen Zustände wird derart vorgenommen, dass die gespeicherten Daten bei einer Auftragung im Zustandsraum auf einem Gitter mit möglichst homogener Auslösung vorliegen. Während des Flammenverlöschens sinkt die Enthalpie an der Wand monoton auf einen Gleichgewichtswert ab. Um eine homogene

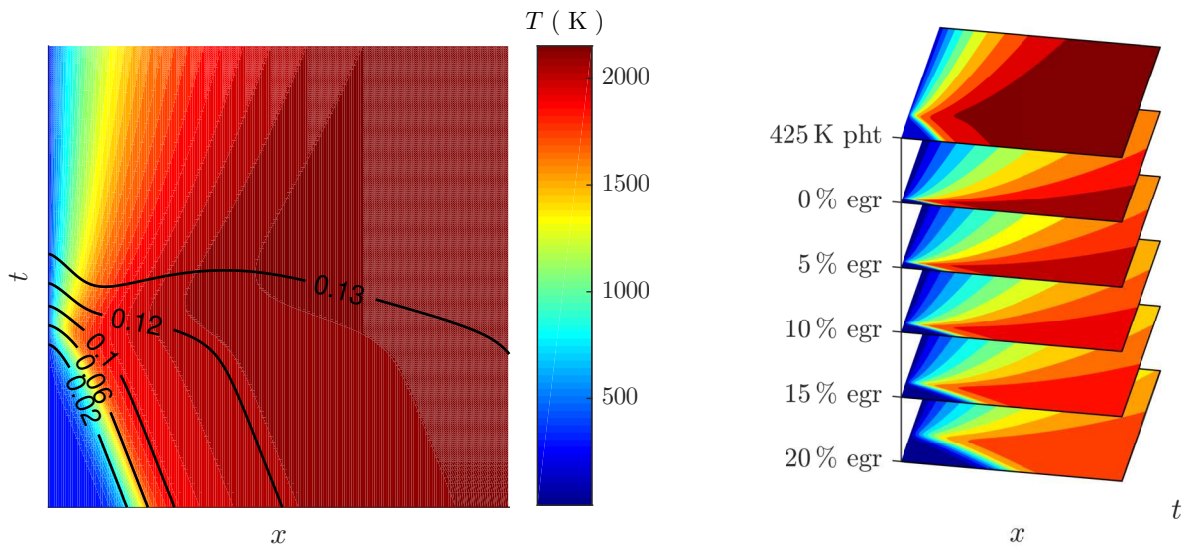


Abbildung 5.13: Temperaturverteilung im Zeit-Orts-Raum für ein HOQ-Szenario (links) und eine Serie solcher Darstellungen unter Variation der Frischgasbedingungen (rechts).

Auflösung im Zustandsraum zu erhalten, werden lediglich Zeitschritte verwendet, deren Wandenthalpiewerte näherungsweise äquidistant über die gesamte Spanne der Wandenthalpiewerte verteilt sind. Dies führt dazu, dass in der Abkühlphase des Flammenverlöschens, in welcher sich der chemische Zustand nur noch langsam ändert, nur eine geringe Submenge der Zeitschritte der Simulation für die Tabellierung gespeichert wird. Dies führt auf eine Gesamtzahl von etwa 6,5 Mio. eindimensionaler Flammenprofile, die in den Tabellierungsprozess einfließen. Zur Berechnung der Daten wurden etwa 90 000 CPUh benötigt.

5.3.2.2 Hierarchische Normierung der Kontrollvariablen und Gestaltung des Tabellenzugriffs

In einem zweiten Schritt werden die Daten des chemischen Zustands derart interpoliert, dass ein schneller Zugriff mithilfe der Kontrollvariablen möglich ist. Wie im Kapitel 2.2 beschrieben wird, können mit dem FASTEST-Code neben der adiabaten auch isotherme Randbedingungen genutzt werden. Da jedoch nicht die Temperatur, sondern die Enthalpie transportiert wird, ist die Temperaturrandbedingung in eine Enthalpierandbedingung zu übersetzen. Dies wird ebenfalls über den Zugriff auf eine zweite Tabelle realisiert, welche die Kontrollvariablen Y_{CO_2} , Y_{CO} und die Temperatur nutzt und die Enthalpie als Tabellengröße enthält. Tabelle 5.1 gibt einen Überblick über die beiden in FASTEST verwendeten Tabellen. Hierbei wird die Tabelle, welche im Inneren des Rechengebiets genutzt wird, mit *innere Tabelle* bezeichnet, während die Tabelle zur Abfrage der Enthalpierandbedingung als *äußere Tabelle* bezeichnet wird.

Für einen schnellen Tabellenzugriff werden die Daten auf ein kartesisches Gitter im normierten Kontrollvariablenraum interpoliert. Die Erstellung des Gitters und die Definitionen der normierten Kontrollvariablen werden nachfolgend beschrieben. Ausgehend von dem Zeit-Orts-Gitter entsprechend Abbildung 5.13 (links), auf welchem die Daten ur-

Tabelle 5.1: Tabellentypen in FASTEST: Die *innere Tabelle* für das Innere des Rechengebiets und die *äußere Tabelle* für die Gebietsränder.

Innere Tabelle		
Kontrollvariablen	Ausgangsgrößen	Post-processing-Größen
$Y_{\text{CO}_2}, Y_{\text{CO}}, h$	$\rho, \mu, \dot{\omega}_{\text{CO}_2}, \dot{\omega}_{\text{CO}}$	T, Y_i

Äußere Tabelle		
Kontrollvariablen	Ausgangsgrößen	Post-processing-Größen
$Y_{\text{CO}_2}, Y_{\text{CO}}, T$	h, ρ, μ	-

sprünglich vorliegen, wird der chemische Zustand, insbesondere Y_{CO} und die Temperatur, auf Iso- Y_{CO_2} -Linien interpoliert. Dies wird für alle HOQ-Simulationen, also alle egr/pht-Stützstellen, separat durchgeführt. Abbildung 5.14 zeigt beispielhaft die Isolinie $Y_{\text{CO}_2} = 0,1$ für alle 26 egr/pht-Stützstellen. Hierbei wurde Y_{CO} über der Temperatur aufgetragen, welche einer Kontrollvariablen der äußeren Tabelle entspricht. Weiterhin ist der Quellterm von CO_2 eingefärbt. In der Abbildung findet sich die Simulation mit 425 K als obere

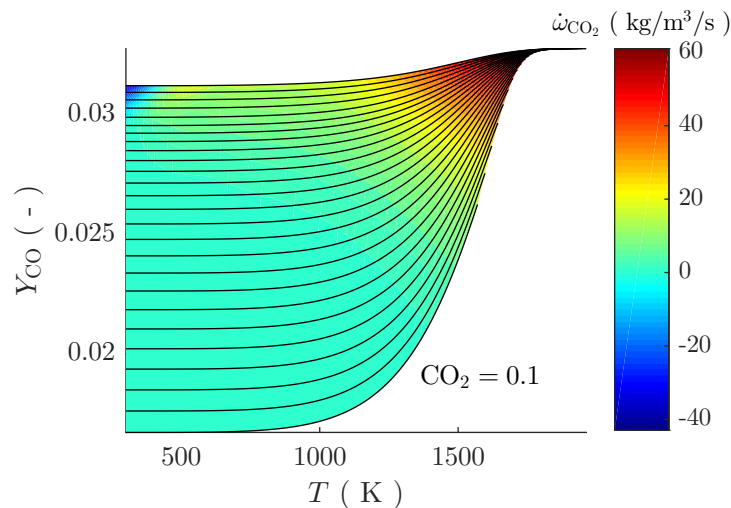


Abbildung 5.14: Quellterm von CO_2 im $Y_{\text{CO}}-T$ -Raum für $Y_{\text{CO}_2} = 0,1$

Begrenzung und die Simulation mit einem Abgasanteil von 20 % als untere Begrenzung der Zustandsfläche wieder.

Fügt man mehrere Iso- Y_{CO_2} -Flächen entsprechend Abbildung 5.14 zusammen, so entsteht ein Zustandsvolumen, welches in Abbildung 5.15 im $Y_{\text{CO}_2}-Y_{\text{CO}}-T$ -Raum dargestellt ist. Der Farbverlauf zeigt wiederum den Quellterm von CO_2 .

Durch eine hierarchische Normierung der Kontrollvariablen wird das in Abbildung 5.15 gezeigte Zustandsvolumen in einen Einheitswürfel abgebildet. Diese Abbildung auf einen Einheitswürfel in Kombination mit einer äquidistanten Verteilung der Stützstellen ermöglicht einen nicht suchenden Tabellenzugriff, da dann die Interpolationsindizes linear von den normierten Kontrollvariablen abhängen.

Zur Abbildung des Volumens in einen Einheitswürfel müssen zunächst die sechs Seiten des Einheitswürfels auf das Volumen projiziert werden. Hierbei ergibt sich aus dem Konzept

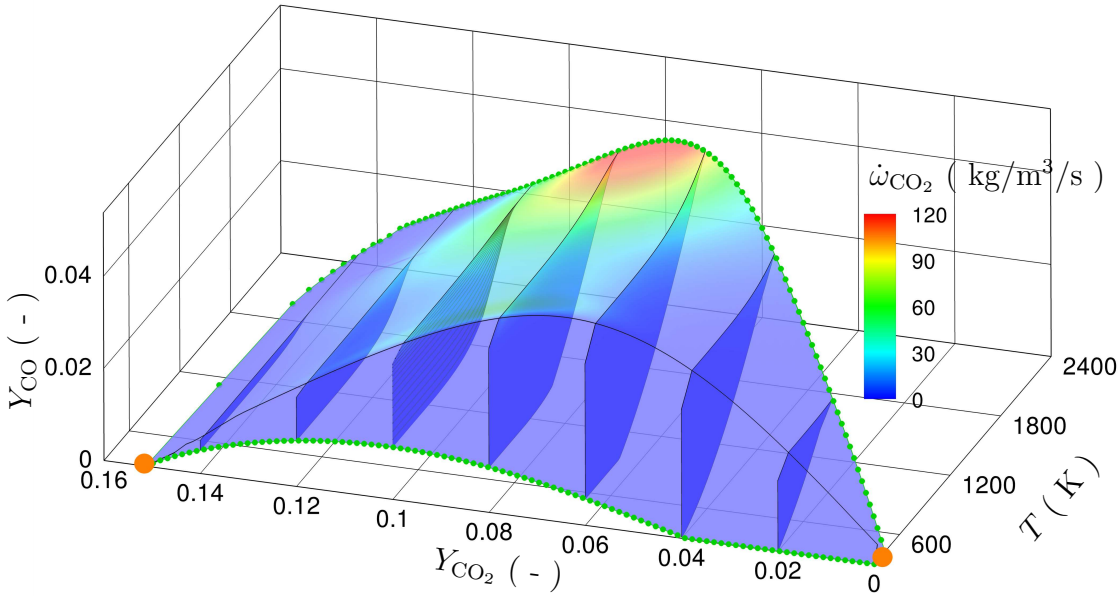


Abbildung 5.15: Zustandsvolumen der HOQEGR-Tabelle (*äußere Tabelle*) mit Normierungspunkten und Normierungskanten.

der hierarchischen Normierung, bei welcher die Kontrollvariablen in einer bestimmten Reihenfolge normiert werden, dass für die Identifikation der sechs Seiten des Einheitswürfels lediglich zwei Punkte, zwei Kanten und zwei Flächen des Zustandsvolumens genutzt werden dürfen. Das heißt, dass zwei Seiten des Einheitswürfels auf jeweils einen Punkt, und zwei weitere Seiten auf jeweils eine Linie zusammenfallen müssen.

Im Rahmen dieser Arbeit werden die Punkte $Y_{\text{CO}_2, \min}$ und $Y_{\text{CO}_2, \max}$ (rote Punkte in Abbildung 5.15) zur Bildung der Vorder- und Rückseite des Würfels genutzt. Die Kanten $Y_{\text{CO}, \min}$ und $Y_{\text{CO}, \max}$ (grün gepunktete Kanten) bilden die Ober- und Unterseite des Würfels. Sie entsprechen den Extremwerten von Y_{CO} und werden als Normierungsvektoren in Abhängigkeit des normierten CO_2 -Massenbruchs gespeichert. Sämtliche Oberflächen des Volumens bilden je nach Orientierung relativ zur Temperaturkoordinate die linke oder die rechte Würfelseite. Diese sind in Abbildung 5.16 für einen Teil der Tabelle dargestellt. Definiert man den Oberflächennormalenvektor so, dass er immer aus dem Volumen herauszeigt, so stellt ein Flächensegment eine obere Grenze der Temperatur dar, wenn sein Normalenvektor einen positiven Anteil entlang der Temperaturkoordinate hat (graue Flächen). Andernfalls stellt es eine untere Grenze der Temperatur dar (blaue Flächen). Diese Oberflächen werden als zweidimensionale Normierungstabellen in Abhängigkeit der normierten Massenbrüche von CO_2 und CO gespeichert. Abbildung 5.17 zeigt die innere Tabelle im Y_{CO_2} - Y_{CO} - h -Raum. Sie lässt sich in analoger Weise zum beschriebenen Vorgehen normieren, wobei die Enthalpie an die Stelle der Temperatur tritt. Durch die Abbildung des Volumens in einen Einheitswürfel im Raum der normierten Kontrollvariablen ergibt sich bei äquidistanter Verteilung der Stützstellen ein linearer Zusammenhang zu den Tabellenindizes. Ihre Ermittlung ist in Abbildung 5.18 für die innere Tabelle (links) und für die äußere Tabelle (rechts) schematisch dargestellt und nachfolgend erläutert. Zur Berechnung der Interpolationsindizes wird zunächst der transportierte CO_2 -Massenbruch

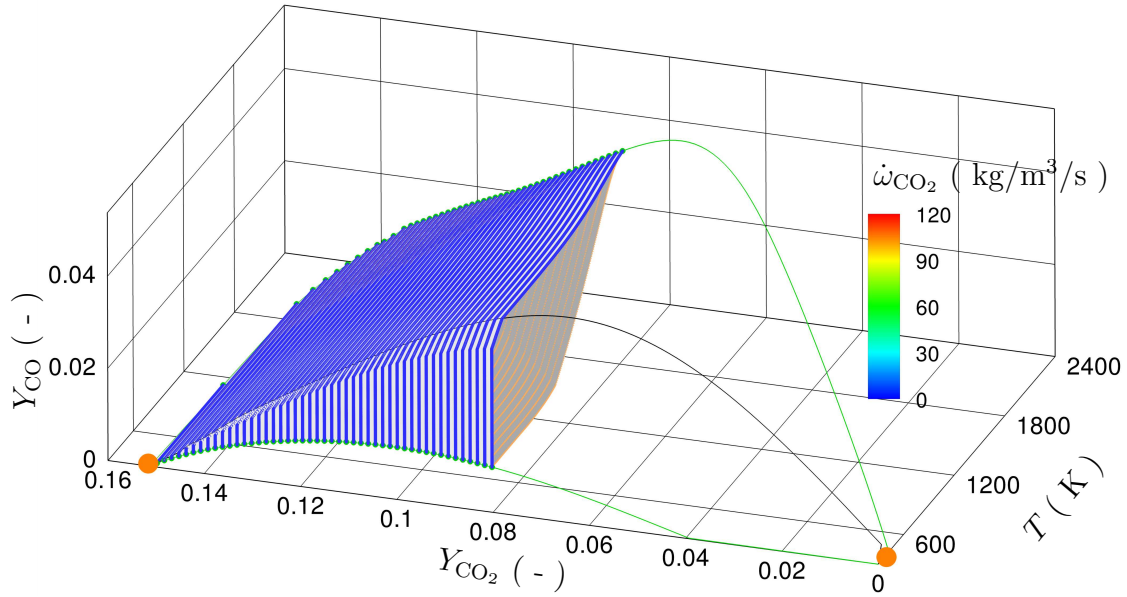


Abbildung 5.16: Zustandsvolumen der HOQEGR-Tabelle (*äußere Tabelle*) mit Normierungsflächen.

mithilfe seiner globalen Extrema $Y_{\text{CO}_2,\min}$ und $Y_{\text{CO}_2,\max}$ mit

$$Y_{\text{CO}_2,n} = \frac{Y_{\text{CO}_2} - Y_{\text{CO}_2,\min}}{Y_{\text{CO}_2,\max} - Y_{\text{CO}_2,\min}} \quad (5.9)$$

normiert. Der normierte CO_2 -Massenbruch lässt dann die Ermittlung der Extrema des CO -Massenbruchs $Y_{\text{CO},\min}(Y_{\text{CO}_2,n})$ und $Y_{\text{CO},\max}(Y_{\text{CO}_2,n})$ durch Interpolation der eindimensionalen Normierungstabellen zu. Die so ermittelten Extrema werden zur Normierung des CO -Massenbruchs genutzt

$$Y_{\text{CO},n} = \frac{Y_{\text{CO}} - Y_{\text{CO},\min}}{Y_{\text{CO},\max} - Y_{\text{CO},\min}}. \quad (5.10)$$

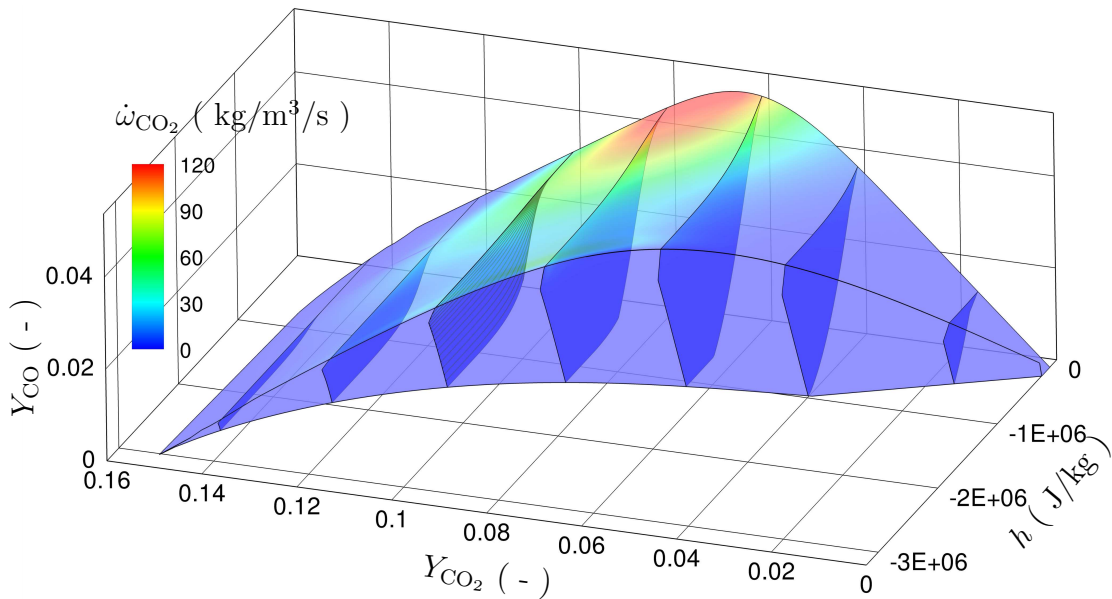


Abbildung 5.17: Zustandsvolumen der HOQEGR-Tabelle (*innere Tabelle*).

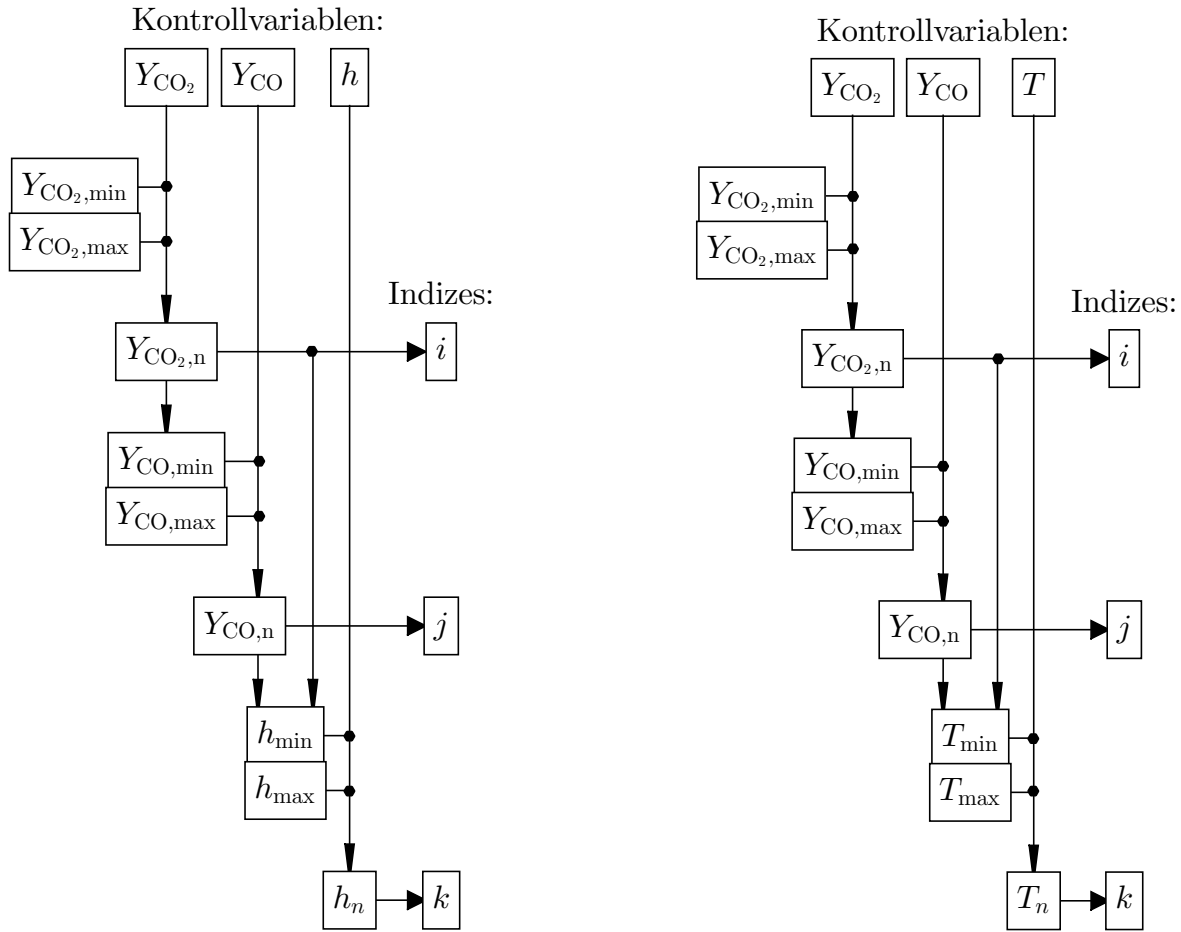


Abbildung 5.18: Schematischer Ablauf bei der Berechnung der Interpolationsindizes für die innere Tabelle (links) und für die äußere Tabelle (rechts).

Der normierte CO-Massenbruch wird schließlich zusammen mit dem normierten CO₂-Massenbruch zur Ermittlung der Enthalpie- bzw. der Temperaturextrema durch bilineare Interpolation der zweidimensionalen Normierungstabellen $T_{min}(Y_{CO_2,n}, Y_{CO,n})$ und $T_{max}(Y_{CO_2,n}, Y_{CO,n})$ verwendet. Damit kann für das Gebietsinnere die Enthalpie bzw. für die Gebietsränder die Temperatur normiert werden

$$h_n = \frac{h - h_{min}}{h_{max} - h_{min}}, \quad (5.11)$$

$$T_n = \frac{T - T_{min}}{T_{max} - T_{min}}. \quad (5.12)$$

Die Tabellenindizes i , j und k , welche für die Interpolation des chemischen Zustands erforderlich sind, lassen sich jeweils über die normierten Kontrollvariablen und ihrer jeweiligen Stützstellenanzahl berechnen.

Nachfolgend sind zwei Anmerkungen zur hier gewählten Reihenfolge bei der hierarchischen Normierung erläutert:

1. Zur Sicherstellung der Eindeutigkeit der Tabelle muss die Variable, die als erstes normiert wird, absolut monoton sein. Das heißt, dass Isoflächen dieser Variablen

im Zeit-Orts-egr/pht-Raum keine Löcher haben dürfen. Jede weitere Normierungsvariable muss mindestens für konstante Werte der vorangehend gewählten Normierungsvariablen monoton sein. Y_{CO_2} beispielsweise ist im Rahmen der hier generierten chemischen Zustände absolut monoton, Y_{CO} hingegen nicht. Damit ist Y_{CO} als erste Normierungsvariable ausgeschlossen. Y_{CO} ist jedoch für konstante Y_{CO_2} -Werte monoton. Das heißt, Y_{CO} -Isolinien weisen innerhalb einer Y_{CO_2} -Isofläche keine Lücken auf. Damit kommt Y_{CO} als zweite Normierungsvariable in Frage.

2. Ein weiterer Aspekt hinsichtlich der Wahl der Reihenfolge ist die Konsistenz der beiden Tabellen zueinander. Konsistenz der Tabellen meint, dass die Zustände, die über einen Zugriff auf die beiden Tabellen erhalten werden, gleich sind. Hierbei tritt die Temperatur einmal als Zugriffsparameter und einmal als Interpolationsgröße auf. Inkonsistenzen entstehen im Wesentlichen durch bestimmte Interpolationsfehler. Interpolationsfehler, welche für beide Tabellen in gleicher Weise auftreten, verursachen keine Inkonsistenz zwischen den Tabellen. Erst durch die Interpolation auf das äquidistante Temperatur- bzw. Enthalpiegitter werden Interpolationsfehler eingeführt, welche als Inkonsistenz sichtbar werden. Um diese Fehler so gering wie möglich zu halten, wird die Normierung der Temperatur bzw. Enthalpie als letzter Interpolationsschritt durchgeführt. Damit ist lediglich eine eindimensionale Interpolation erforderlich, welche mit hoher Ordnung durchgeführt werden kann. Zudem müssen keine weiteren Interpolationen erfolgen, welche zu einer Ausbreitung des Fehlers führen würden.

Somit ist die Reihenfolge der hierarchischen Normierung mit den Positionen (1) = Y_{CO_2} , (2) = Y_{CO} und (3) = Enthalpie/Temperatur festgelegt.

5.3.3 Basisverifikation

In diesem Abschnitt wird die in dieser Arbeit entwickelte HOQEGR-Chemietabelle verifiziert. Hierzu wird die Chemietabelle zur Simulation verschiedener Testfälle verwendet und mit den Ergebnissen entsprechender Detaillierter-Chemie-Simulationen verglichen. Weiterhin werden die Simulationsergebnisse, welche auf der neuen Tabelle basieren, mit entsprechenden Ergebnissen der FGM-Tabelle und der nachfolgend beschriebenen HOQ-Tabelle verglichen.

5.3.3.1 Die HOQ-Tabelle

Zur Bewertung und Analyse der HOQEGR-Tabelle wird in Abschnitt 5.3.4.2 eine weitere Referenztablette, die HOQ-Tabelle, verwendet. Sie stellt als zweidimensionale Chemietabelle eine Submenge der hier entwickelten dreidimensionalen HOQEGR-Chemietabelle dar. Damit kann im Rahmen eines Vergleichs der HOQEGR-Tabelle mit der HOQ-Tabelle der Einfluss der dritten Kontrollvariablen isoliert aufgezeigt werden.

Die HOQ-Tabelle setzt sich hierbei aus zwei Tabellenteilen zusammen: Ein Teil der Tabelle enthält zunächst die Detaillierten-Chemie-Ergebnisse der HOQ-Simulation bei 300 K Frischgastemperatur ohne Abgasbeimengung. Dieser Teil der HOQ-Tabelle stellt also eine Schnittfläche im Inneren der HOQEGR-Tabelle dar. Sie ist beispielsweise in den Abbildungen 5.10 und 5.11 als dünne schwarze Linie sichtbar, welche den vorgewärmten und

den mit Abgas verdünnten Teil der HOQEGR-Tabelle voneinander trennt. Um höhere Enthalpien abzudecken, werden der HOQ-Tabelle analog zur FGM- und HOQEGR-Tabelle vorgewärmte frei propagierende Flammen angefügt. Dieser Teil der HOQ-Tabelle stellt also eine Außenfläche der HOQEGR-Tabelle dar, welche in Abbildung 5.12 (rote Linien) gezeigt ist. Die Zustände werden schließlich auf die Kontrollvariablen Enthalpie und Y_{CO_2} projiziert.

Ein Vergleich der HOQ-Tabelle mit der REDIM-Tabelle zeigt, dass die beiden Tabellen bis auf geringe Abweichungen identisch sind. Dies wird auch an den in Abschnitt 5.3.4.1 gezeigten Ergebnissen sichtbar.

5.3.3.2 Verifikationsfall I: Frei propagierende Flamme

Die hier verwendeten adiabaten Testfälle entsprechen jeweils einer frei propagierenden Flamme, bei welcher die Frischgastemperatur und Abgasbeimengung (Abgasrückführungsrate) variiert wird. Die Randbedingungen der Testfälle sind in Tabelle 5.2 gelistet. Da die

Tabelle 5.2: Randbedingungen der frei propagierenden Flammen

Fall	Frischgastemperatur	Abgasrückführungsrate
(a)	300 K	5 %
(b)	300 K	0 %
(c)	400 K	0 %

Randbedingungen der Testfälle mit denen der Simulationen im Rahmen der Tabellenerzeugung übereinstimmen, sind auch die skalaren Dissipationsraten identisch. Damit ist zu erwarten, dass die HOQEGR-Tabelle die Flammen perfekt reproduzieren kann, sodass sich der Fall zur Überprüfung des Tabellierungskonzeptes und der Implementierung eignet. Das verwendete numerische Gitter hat eine konstante Gitterweite von $25 \mu\text{m}$.

Abbildung 5.19 zeigt die Simulationsergebnisse der Detaillierten-Chemie-Rechnung, welche als Referenz dient, die Ergebnisse der HOQEGR-Tabelle sowie die Ergebnisse der FGM- und der HOQ-Tabelle anhand der Profile des CO_2 - und des CO -Massenbruchs sowie deren Quellterme. Für die Testfälle (b) und (c) ist festzustellen, dass alle Chemietabellen zu einer guten Übereinstimmung mit der Detaillierten-Chemie-Rechnung führen. Dieses Ergebnis entspricht dem Erwartungswert, da diese Konfiguration bei der Erzeugung aller drei Tabellen genutzt wurden. Bei näherer Betrachtung von Testfall (a) ist zu erkennen, dass die HOQEGR-Tabelle alle Profile der Detaillierten-Chemie-Rechnung reproduziert, während sowohl die HOQ-Tabelle als auch die FGM-Tabelle von den Referenzergebnissen abweichen. Dies wird besonders am Profil des CO -Massenbruchs sowie den Profilen der Quellterme beider Spezies deutlich. Bei Testfall (a) enthält das Frischgas 5 % CO_2 bei einem verschwindend geringen Anteil von CO . Bei den zweidimensionalen Tabellen hingegen ist ein CO_2 -Wert größer null immer mit einer bereits eingesetzten chemischen Reaktion des Frischgases verbunden, bei welcher auch CO entsteht. Somit beginnen die zugehörigen CO -Profile mit einem von null verschiedenen Wert vor der Flamme, welcher zur Abweichung von der Referenzsimulation führt. Aufgrund des veränderten CO/CO_2 -Verhältnisses ergeben sich schließlich Abweichungen für die jeweiligen Quellterm, wie ebenfalls in Abbildung 5.19 deutlich wird.

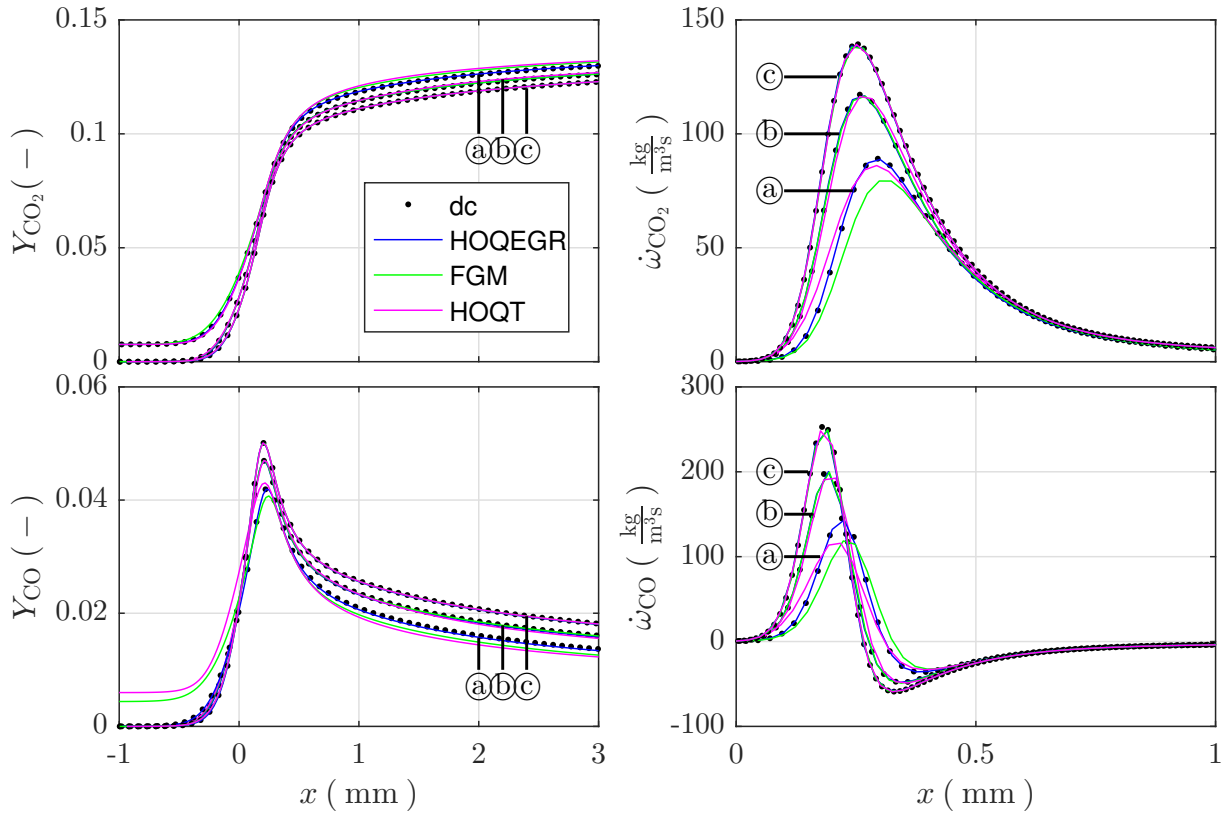


Abbildung 5.19: Verifikationsfall I: Frei propagierende Flammen mit variierenden Frischgasbedingungen.

Das Ergebnis der FGM-Tabelle für den Testfall (a) quantifiziert an dieser Stelle den Unterschied zwischen der Burner-Stabilized-Flame (BSF)-Konfiguration, welche für die FGM-Tabellenerzeugung genutzt wird, auf der einen Seite und der EGR-Konfiguration, welche diesen Testfall kennzeichnet, auf der anderen Seite. Eine FGM-Tabelle auf Basis von EGR-Konfigurationen würde als Submenge der HOQEGR-Tabelle ähnlich gute Ergebnisse hervorbringen.

Als wesentliches Fazit kann damit geschlussfolgert werden, dass die HOQEGR-Tabelle in der Lage ist, die adiabaten Flammen, welche zu ihrer Erzeugung genutzt wurden, zu reproduzieren. Im nächsten Unterabschnitt werden nicht adiabate Testfälle betrachtet.

5.3.3.3 Verifikationsfall II: Head-on quenching

Während bei den adiabaten Testfällen lediglich eine zweidimensionale Submenge der HOQEGR-Tabelle entsprechend Abbildung 5.12 genutzt wird, kommt es bei den HOQ-Testfällen zur Verwendung des Inneren des Zustandsvolumens, welches in den Abbildungen 5.15 und 5.17 dargestellt ist. Die HOQ-Testfälle nutzen die frei propagierenden Flammen als Startlösungen, wobei die Fallbezeichnungen entsprechend Tabelle 5.2 beibehalten werden. Für die Wandtemperaturen werden die jeweiligen Frischgastemperaturen genutzt. Zur Bewertung der transienten HOQ-Testfälle wird nachfolgend der Wandwärmefluss verglichen, welcher in Abbildung 5.20 als zeitlicher Verlauf dargestellt ist. Der Wandwärme-

fluss wird hierbei entsprechend

$$\dot{q}_{\text{Wand}} = \left| -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{\text{Wand}} \quad (5.13)$$

berechnet. Es ist zu sehen, dass die HOQEGR-Tabelle in der Lage ist, den Wandwärmefluss für alle drei Testfälle mit geringen Abweichungen zu reproduzieren. Deutliche Abwei-

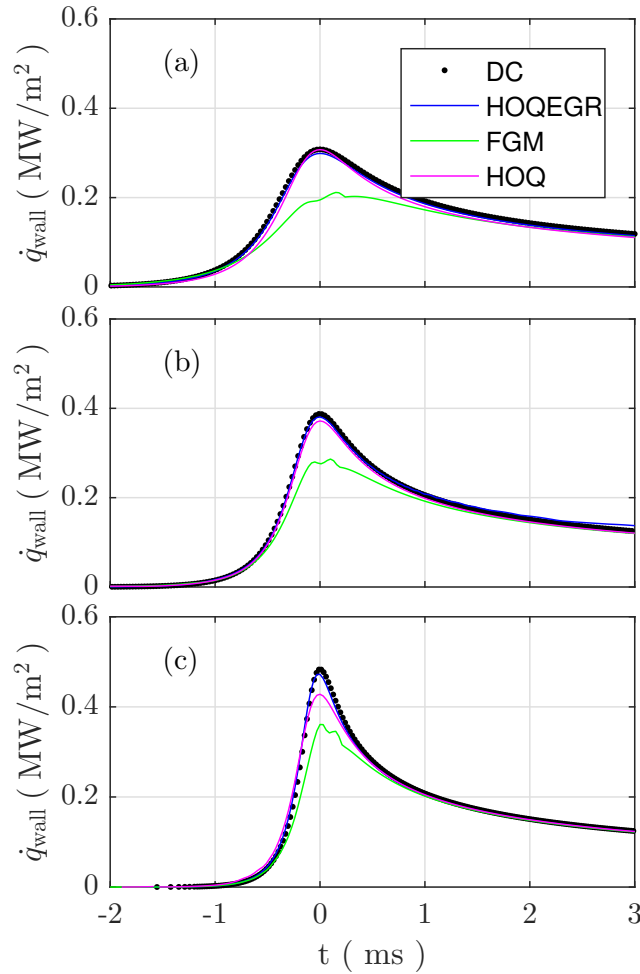


Abbildung 5.20: Verifikationsfall II: Wandwärmeflüsse beim HOQ als zeitlicher Verlauf für verschiedene Frischgasbedingungen.

chungen hingegen treten bei allen Testfällen für die Ergebnisse der FGM-Simulation auf. Der Wandwärmefluss wird hierbei signifikant unterschätzt. Dieses Ergebnis lässt sich auf vergleichsweise geringe CO_2 -Quellterme bei niedrigen Enthalpien zurückführen, welche zu einem größeren Wandabstand und damit zu einem kleineren Wandwärmefluss führen. Die HOQ-Tabelle zeigt geringe Abweichungen im Testfall (b), die auf Ungenauigkeiten im Tabellierungsprozess hindeuten, da dieser Testfall, welcher der Tabellierungsgrundlage der HOQ-Tabelle entspricht, reproduziert werden müsste. Die Abweichungen in Testfall (a) hingegen sind ähnlich wie bei der frei propagierenden Flamme durch die abweichenden chemischen Zustände im Frischgas zu erklären. Im Rahmen von Testfall (c) führt die

HOQ-Tabelle zu einer leichten Unterschätzung des Wandwärmeflusses, welche ähnlich der FGM auf eine Unterschätzung des CO₂-Quellterms hindeutet.

Hiermit kann festgestellt werden, dass zum einen die HOQEGR-Tabelle alle HOQ-Testfälle reproduzieren kann. Zum anderen reproduziert die HOQ-Tabelle ihre Erzeugungskonfiguration (Testfall (b)) mit nur geringfügigen Abweichungen. Insbesondere der letzte Punkt ist eine wichtige Feststellung, da die HOQ-Tabelle, wie in Abschnitt 5.3.3.1 besprochen wurde, eine wichtige Referenz für die Bewertung der HOQEGR-Tabelle darstellt.

5.3.4 Anwendung der HOQEGR-Tabelle auf die SWQ-Konfiguration

Die Anwendung der HOQEGR-Tabelle auf die SWQ-Konfiguration, welche in Abschnitt 4.4.2 beschrieben wurde, stellt einen entscheidenden Testfall der Chemietabellenerzeugung dar. Die Ergebnisse der SWQ-Simulation erlauben einen Einblick in die Leistungsfähigkeit der hier entwickelten Tabelle, welche aufgrund der Komplexität der Flamme-Wand-Interaktion schwer vorherzusagen ist.

Zur Bewertung der Ergebnisse wird die Simulation auf Basis der Detaillierten Chemie genutzt, deren gute Übereinstimmung mit experimentellen Ergebnissen bereits in Abschnitt 4.4 gezeigt wurde. Es sei an dieser Stelle noch einmal darauf hingewiesen, dass im Unterschied zu den in Abschnitt 4.4 gezeigten Ergebnissen in diesem Abschnitt lediglich Simulationsergebnisse unter Verwendung des Smooke-Mechanismus dargestellt sind, weshalb sich insbesondere Unterschiede hinsichtlich der CO-Ergebnisse ergeben.

Aus der Literatur ist bekannt, dass die SWQ-Konfiguration im Vergleich zur entsprechenden HOQ-Konfigurationen geringere Verlöschabstände aufweist [20]. Wie bereits in Abschnitt 5.1.3 erwähnt, treten dementsprechend bei der SWQ-Konfiguration geringere Enthalpiegradienten auf. Während die FGM-Tabelle diese Enthalpiegradienten gar nicht berücksichtigt, werden bei der Tabellenerzeugung der REDIM und auch der HOQ-Tabelle zu große Gradienten angenommen, wie ebenfalls in Abschnitt 5.1.3 festgestellt wurde. Demgegenüber steht die HOQEGR-Tabelle, welche ausgehend von einer Submenge, die wie die FGM-Tabelle keine Gradienten enthält, ein ganzes Spektrum von Gradienten aufspannt. Die steilsten Gradienten werden dabei durch die vorgewärmten HOQ-Simulationen beigesteuert. Hierdurch sind die Bedingungen der SWQ-Konfiguration hinsichtlich der Enthalpiegradienten in der HOQEGR-Tabelle enthalten.

Da jedoch ansonsten keine chemischen Zustände und auch keine Gradienteninformationen der SWQ-Konfiguration bei der HOQEGR-Tabellierung benutzt werden, stellt dieser Testfall eine Möglichkeit dar, die Universalität der Tabelle zu bewerten, welche durch die Einführung der zusätzlichen Kontrollvariablen generiert wird.

5.3.4.1 Ergebnisse

Als ein globales Maß für die Vorhersagefähigkeit im Kontext der Flamme-Wand-Interaktion soll zunächst der Wandwärmefluss betrachtet werden. Hierbei wird der Wandwärmefluss entsprechend Gleichung 5.13 entlang der Wand berechnet. Die entsprechenden Ergebnisse sind in Abbildung 5.21 für die Detaillierte-Chemie-Rechnung, die FGM- und die HOQ-Tabelle sowie die HOQEGR-Tabelle dargestellt. Es zeichnet sich ein klares Bild der

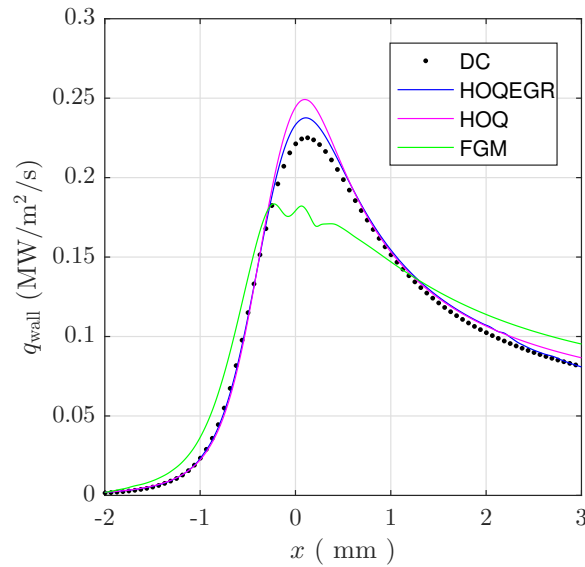


Abbildung 5.21: Wandwärmefluss der laminaren SWQ-Simulation entlang der Wand für die Detaillierte Chemie, die HOQEGR-, die HOQ- sowie die FGM-Simulation.

Vorhersagequalität der einzelnen Tabellen ab. Während die FGM, welche keine Enthalpiegradienten berücksichtigt, zu einer starken Unterschätzung des Wandwärmeflusses führt, wird dieser im Rahmen der HOQ-Tabelle überschätzt. Die HOQ-Tabelle liegt damit jedoch deutlich näher an dem Ergebnis der Detaillierten-Chemie-Rechnung. Beide Tabellen können den tatsächlich vorliegenden Enthalpiegradienten, der sich während der Simulation im Rahmen des Enthalpietransports einstellt, nicht in Form eines Zugriffsparameters berücksichtigen. Im Gegensatz hierzu führt die Einführung der dritten Kontrollvariablen zu einer weiteren Verbesserung der Vorhersage des Wandwärmeflusses. Die Überschätzung des HOQ-Ergebnisses wird dabei etwa halbiert, sodass durch die HOQEGR-Tabelle eine deutlich bessere Vorhersagezuverlässigkeit erreicht wird.

Ein weiteres interessantes Ergebnis stellt die Verteilung des CO-Massenbruchs im Bereich des Flammenverlöschens dar. Wie in den vorangegangenen Kapiteln erwähnt wurde, verändert sich das CO-Profil einer Flamme, wenn sie in Kontakt mit der nicht adiabaten Wand kommt, sodass dort, wie in Abschnitt 4.4.4 erläutert, eine CO-Akkumulation stattfindet. Um die Vorhersagezuverlässigkeit der HOQEGR-Tabelle zu vergleichen, werden analog zu den Darstellungen 4.16 (links) und 5.5 (mittig) wandnormale CO-Profile extrahiert. Abbildung 5.22 zeigt die entsprechenden Profile an den Positionen $x_q = -2; -0,5; 0$ und $2,0$ mm, wobei zur Konditionierung der wandparallelen Koordinate die Kontaktpunktdefinition gemäß Gleichung 4.9 genutzt wird.

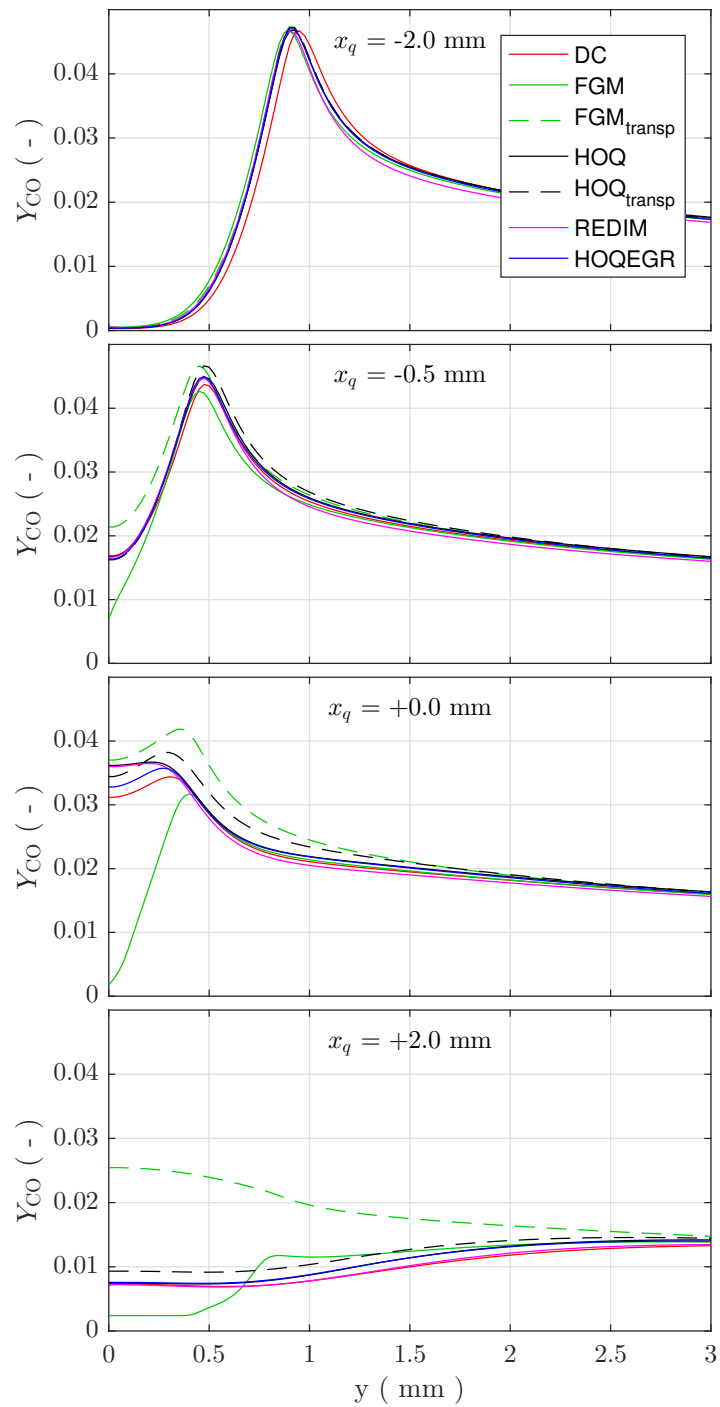


Abbildung 5.22: Wandnormale CO-Profile der laminaren SWQ-Konfiguration für die Detaillierte Chemie, die FGM-Tabelle, die FGM-Tabelle mit passivem CO-Transport, die HOQ-Tabelle, die HOQ-Tabelle mit passivem CO-Transport, die REDIM-Tabelle und die HOQEGR-Tabelle.

Die Ergebnisse der Detaillierten-Chemie-Rechnung dienen hierbei wiederum als Referenz. Die FGM-Simulationsergebnisse stellen den Ausgangspunkt der Vorhersagegenauigkeit im Rahmen der Tabellierten Chemie dar. Wie an den Position $x_q = -0,5; 0$ und $2,0\text{ mm}$ zu sehen ist, unterschätzt sie den CO-Massenbruch an der Wand. Weiterhin ist sie nicht in der Lage, die Null-Gradient-Randbedingung zu reproduzieren, welche sich aus der Stoffundurchlässigkeit der Wand ergibt. Eine erste Verbesserung des Ergebnisses hinsichtlich der Randbedingung kann mit der FGM-Tabelle erzielt werden, wenn der CO-Massenbruch passiv transportiert wird. Dies meint, dass eine Transportgleichung für den CO-Massenbruch auf Basis des tabellierten CO-Quellterms gelöst wird, jedoch keine Rückkopplung des CO-Massenbruchs in Form eines Tabellenzugriffsparameters stattfindet. Der transportierte CO-Massenbruch, welcher stark von dem tabellierten Wert abweicht, bildet die Null-Gradient-Randbedingung an der Wand inhärent ab. Wie an Position 0 und 2 mm zu sehen ist, führt der passive Transport jedoch zu einer Überschätzung des CO-Massenbruchs, welche bis zu einem Wandabstand von $1,5\text{ mm}$ deutlich erkennbar ist. Die Überschätzung lässt sich darauf zurückführen, dass ein erhöhter CO-Massenbruch bei einer gegebenen Enthalpie und Komposition physikalisch zu einer Verringerung seiner Produktion führen würde. Der CO-Quellterm ist jedoch im Kontext der FGM-Tabelle nicht von der CO-Konzentration abhängig, sodass die Verringerung der CO-Produktion unterbleibt und somit zu viel CO produziert wird.

Betrachtet man die Simulationsergebnisse der HOQ- und der REDIM-Tabelle, so stellt man eine große Übereinstimmung der Ergebnisse fest. Dies ist darauf zurückzuführen, dass bei der REDIM-Erzeugung HOQ-Gradienten verwendet wurden. Geringfügige Abweichungen werden lediglich bei Wandabständen größer $0,5\text{ mm}$ sichtbar. Die beiden Simulationen decken sich insgesamt gut mit den Ergebnissen der Detaillierten Chemie mit Ausnahme der Position 0 mm , wo die Profile bei einem Wandabstand unter $0,4\text{ mm}$ zu flach werden und infolgedessen zu einer Überschätzung des CO-Wertes an der Wand führen. Die vergleichsweise flachen Profile sind hierbei als Folge der Überschätzung der CO-Diffusion durch die Annahme der HOQ-Gradienten zu sehen. Wird die HOQ-Tabelle mit einem passiven CO-Transport kombiniert, so ergibt sich eine Verbesserung der CO-Profile hinsichtlich ihrer Steigung an der Wand. Der Verlauf wird dort nahezu parallel zum Referenzergebnis. Jedoch führt das passive Lösen der CO-Transportgleichung, wie auch schon beim FGM-Ergebnis zu beobachten war, zu einer Überschätzung des CO-Massenbruchs, die sich bis zu einem Wandabstand von mehr als $1,5\text{ mm}$ erstreckt. Das genaueste Ergebnis wird durch die HOQEGR-Tabelle erzielt. Diese reproduziert die Steigung des CO-Profils an der Wand und führt lediglich zu einer leichten Überschätzung des CO-Massenbruchs in einem lokalen Bereich, welcher durch einen Wandabstand von $0,4\text{ mm}$ beschränkt ist.

5.3.4.2 Analyse

Nachfolgend wird geklärt, wie es zur Verbesserung der Ergebnisse durch die Hinzunahme der CO-Kontrollvariablen kommt. Hierzu wird das Ergebnis der HOQ-Tabelle mit passivem Transport des CO-Massenbruchs mit den Ergebnissen der HOQEGR-Tabelle verglichen. Bei Letzterer wird CO sowohl transportiert als auch beim Zugriff auf die Tabelle in Form einer Kontrollvariablen verwendet. Zur Untersuchung wird die Lagrange'sche Analysemethode verwendet, welche in Abschnitt 4.4.4.2 eingeführt wurde. Mit ihrer Hilfe lässt sich der CO-Massenbruch in seinen diffusiven Anteil und seinen reaktiven

Anteil aufspalten, womit der Ursprung des Kohlenmonoxids nachvollzogen werden kann. Abbildung 5.23 zeigt die beiden Anteile des Kohlenmonoxids als Ergebnis dieser Analyse zusammen mit dem Gesamtmassenbruch entlang der wandnormalen Linie an der Position $x_q = 0,0$ mm für die HOQ- und die HOQEGR-Simulation sowie das entsprechende Ergebnis der Detaillierten-Chemie-Rechnung. Während der reaktive Anteil des Kohlenmonoxids

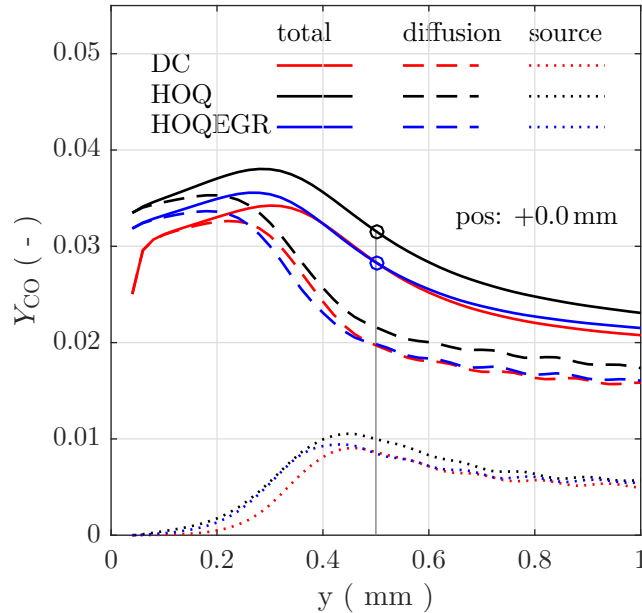


Abbildung 5.23: Diffusiver und reaktiver Anteil des Kohlenmonoxids an der Position $x_q = 0,0$ mm über dem Wandabstand.

einen Beitrag zur Gesamtbilanz des CO-Massenbruchs in einem globalen Sinne hat, führt Diffusion lediglich zu einer Umverteilung der Größe. Um den Ursprung der Abweichung der CO-Profile zu ergründen, wird deshalb im Folgenden der reaktive Anteil näher betrachtet. Die Abweichung des diffusiven Anteils von CO zwischen der HOQ-Tabelle und der HOQEGR-Tabelle stellt einen konstanten Offset dar. Demgegenüber beschränkt sich die Abweichung für den reaktiven Anteil auf den Bereich zwischen den Wandabständen 0,4 und 0,8 mm. Zur Untersuchung der Abweichungen wird deshalb ein repräsentativer Wandabstand von 0,5 mm gewählt, welcher in etwa dem Ort der maximalen Abweichung liegt. Hierauf aufbauend, wird die Stromlinie betrachtet, welche an der Position $x_q = 0$ mm den Wandabstand von 0,5 mm erreicht. Diese Stromlinie ist in Abbildung 5.24 für die Detaillierte-Chemie-Rechnung sowie für die HOQ- und die HOQEGR-Tabellen-Simulation dargestellt. Wie zu sehen ist, weichen die Stromlinien nur geringfügig voneinander ab, sodass die dort herrschenden Strömungsbedingungen als vergleichbar angesehen werden können. Abbildung 5.25 (oben) zeigt schließlich die CO-Akkumulation des diffusiven und des reaktiven Anteils entlang der Zeit für einen fiktiven Partikel, welcher sich entlang der Stromlinie bewegt und schließlich zum Zeitpunkt $t = 0$ ms die Position $x_q = 0$ mm bei dem Wandabstand $y = 0,5$ mm erreicht. Bei Betrachtung des reaktiven Anteils wird klar, dass die Abweichung des Kohlenmonoxids zum Zeitpunkt $t = 0$ ms innerhalb der letzten 0,1 ms vor dessen Erreichen entsteht. Betrachtet man dieses Zeitintervall in Abbildung 5.25 (unten), welche den Quellterm von CO zeigt, so stellt man fest, dass erstens

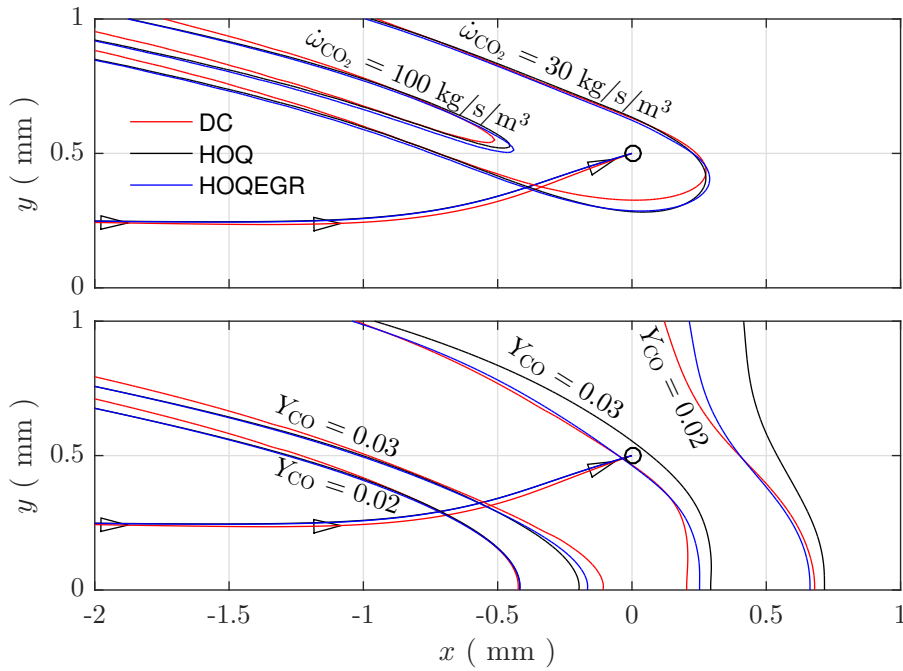


Abbildung 5.24: Repräsentative Stromlinie zur Untersuchung der CO-Ergebnisse der HOQ- und der HOQEGR-Tabelle.

der Quellterm von CO in dieser Region negativ ist, zweitens die HOQEGR-Simulation dort negativere Quellterme als die HOQ-Simulation aufweist und drittens diese Differenz durch einen Zugriff im vorgewärmten Teil der Tabelle verursacht wird, wie im Verlauf der ebenfalls eingezeichneten egr/pht-Koordinate sichtbar wird.

Zur Erklärung der verbesserten CO-Vorhersage an der Position $x_q = 0 \text{ mm}$ durch die HOQEGR-Tabelle lässt sich schlussfolgern, dass zunächst beide Tabellen den CO-Quellterm zum Zeitpunkt $t = -0,18 \text{ ms}$ überschätzen, wobei dies auf die abweichenden skalaren Dissipationsraten zwischen der SWQ- und HOQ-Konfiguration zurückgeführt werden kann. Hierdurch werden im Vergleich zur Referenz größere CO-Konzentrationen erreicht. Während sich der Quellterm der HOQ-Tabelle im weiteren Verlauf bis zum Zeitpunkt $t = 0 \text{ ms}$ wieder an den Referenzverlauf annähert, weicht der Quellterm der HOQEGR-Tabelle hingegen ein weiteres Mal von der Referenz ab, dieses Mal jedoch in die entgegengesetzte Richtung. Dies führt zu einer vollständigen Kompensation der ersten Abweichung, sodass an der Position $x_q = 0 \text{ mm}$ der korrekte CO-Massenbruch erreicht wird. Betrachtet man die zugehörigen Werte der egr/pht-Koordinate, so ist zu erkennen, dass die Kompensation durch den Zugriff im vorgewärmten Bereich der Tabelle stattfindet ($pht = 300\text{-}375 \text{ K}$). Auf diesen Teil der Tabelle wird dann zugegriffen, wenn der vorliegende CO-Massenbruch größer ist als der entsprechende Wert im Kontext der HOQ-Tabelle bei ansonsten gleicher Enthalpie und gleichem CO_2 -Massenbruch. Dies wird auch in Abbildung 5.26 sichtbar, welche den CO-Quellterm im Y_{CO_2} - h -Raum anhand von einigen Isolinien darstellt. Die eingeführte Stromlinie verläuft in dieser Darstellung für die HOQ- und die HOQEGR-Tabelle etwa deckungsgleich (blau und schwarz). Dies zeigt zunächst, dass Zustände entlang der Stromlinien hinsichtlich der Kontrollvariablen Y_{CO_2} und h vergleichbar sind. Weiterhin ist zu sehen, dass sich die Isolinien des CO-Quellterms unterscheiden. Diese Unterschiede

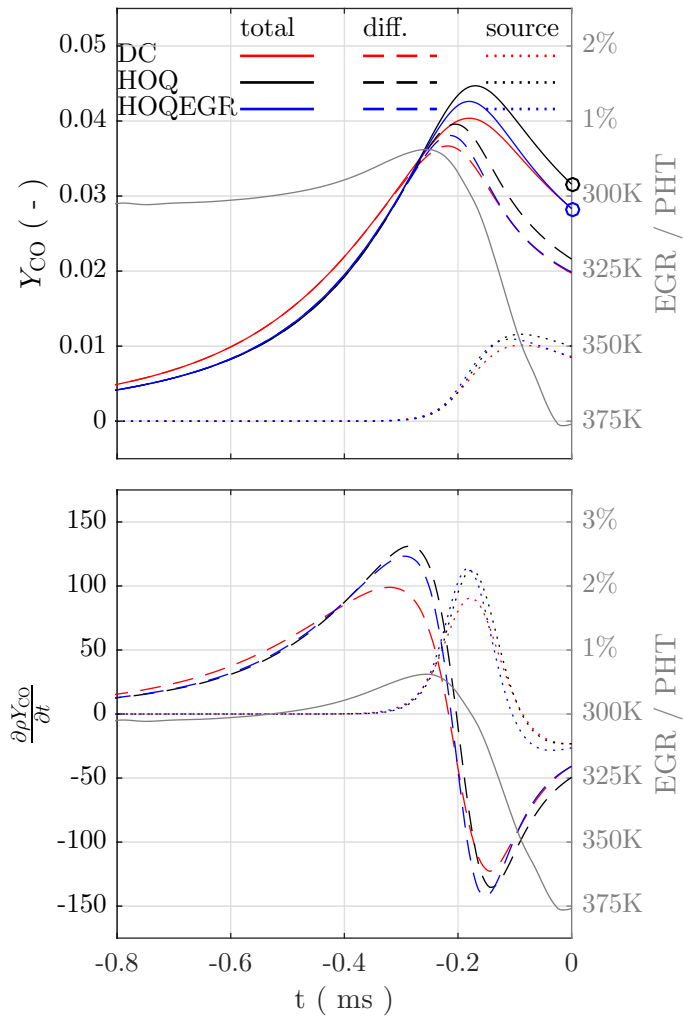


Abbildung 5.25: Akkumulierter diffusiver und akkumulierte reaktiver CO-Anteil (oben) sowie diffusiver Term und reaktiver Term (Quellterm) (unten) entlang der Stromlinie entsprechend Abbildung 5.24 als zeitlicher Verlauf im Sinne der Lagrange'schen Betrachtungsweise.

ergeben sich dadurch, dass der chemische Zustand im Rahmen der HOQEGR-Simulation den zweidimensionalen Zustandsraum der HOQ-Tabelle verlassen hat. Betrachtet man die Endpunkte der Stromlinien, so erkennt man, dass sich für die HOQEGR-Tabelle ein negativer, betragsmäßig größerer Quellterm im Vergleich zu HOQ-Tabelle ergibt. Dieser führt schließlich zur Kompensation des zuvor überschätzten CO-Massenbruchs. Die anfängliche Überschätzung des CO-Quellterms, welche auch in der HOQ-Tabelle stattfindet, führt zwar ebenfalls zu einer Überschätzung des CO-Massenbruchs, diese kann jedoch aufgrund der fehlenden Rückkopplung auf die Tabellen nicht kompensiert werden.

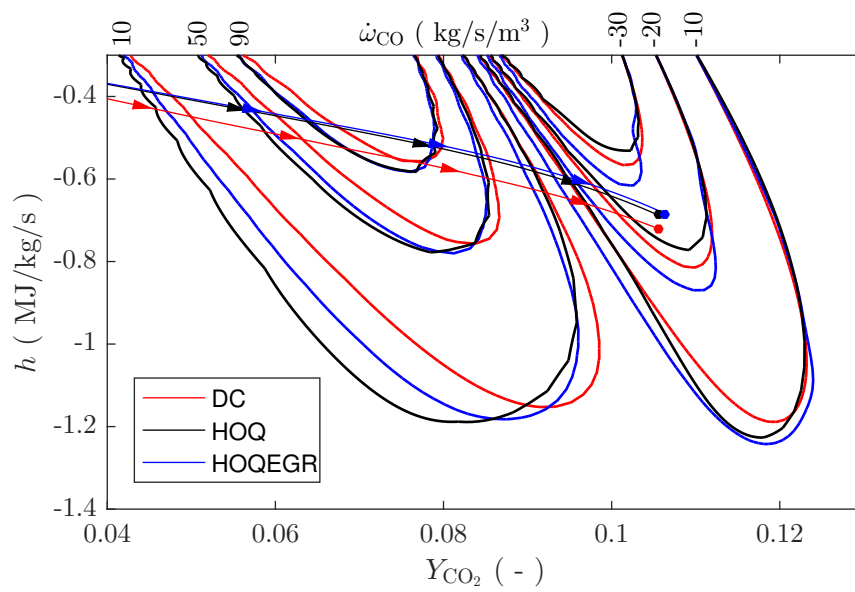


Abbildung 5.26: Isolinien des CO-Quellterms im Zustandsraum (Iso-Werte sind an der Oberseite abzulesen) sowie Stromlinie entsprechend Abbildung 5.24.

Kapitel 6

Zusammenfassung und Ausblick

Diese Arbeit beschäftigte sich mit vorgemischter Verbrennung in der Nähe kalter Wände. Dies beinhaltete die Untersuchung des chemischen Zustands, der sich beim Flammenverlöschen im Kontext verschiedener FWI-Konfigurationen ergibt. Hierbei wurde zunächst eine numerische Simulation des experimentell untersuchten SWQ-Brenners mithilfe des akademischen CFD-Codes FASTEST vorgenommen. Es wurden Analysen der numerischen Ergebnisse dargestellt, welche die grundlegenden Mechanismen offenbarten und die experimentell beobachteten Ergebnisse [48] erklären konnten. Weiterhin wurde ein Tabellierungskonzept entwickelt, welches eine verbesserte Vorhersage der FWI zulässt. Hierzu wurde das Konzept der Tabellierten Chemie weiterentwickelt.

Ein grundlegender Schritt war die Untersuchung der Leistungsfähigkeit der Detaillierten Chemie unter Verwendung des GRI- und des Smooke-Mechanismus im Kontext der FWI hinsichtlich der Vorhersage von Kohlenmonoxid. Hierbei wurde eine hinreichende Vorhersagegenauigkeit beider Mechanismen festgestellt, womit deren Verwendung bei weiteren Analysen gerechtfertigt war. Mithilfe einer Analyse, die auf Basis des Lagrange'schen Ansatzes entwickelt wurde, konnten die in der Literatur beschriebenen CO-Akkumulationen auf einen diffusiven Transport von CO aus dem adiabaten Teil der Flamme zurückgeführt werden. Es wurde zudem ein vernachlässigbarer Einfluss des Soret-Effekts auf die CO-Vorhersage festgestellt, womit ähnliche Erkenntnisse, die in einschlägiger Literatur zu finden sind, bestätigt wurden.

Wie bereits in Heinrichs [39] Arbeiten sichtbar wurde, ist das am Institut etablierte FGM-Modell nicht in der Lage, die CO-Konzentrationen in der FWI-Zone des SWQ-Brenners abzubilden. Eine Budgetanalyse der transformierten Speziestransportgleichung, welche in dieser Arbeit vorgenommen wurde, zeigte auf, dass unphysikalische Annahmen hinsichtlich der skalaren Dissipationsrate des Enthalpiefeldes zu erheblichen Abweichungen hinsichtlich der CO-Vorhersage führten. Diese schließen sowohl Abweichungen der CO-Konzentration als auch die Verletzung der Null-Gradient-Randbedingung dieser Größe an der Wand ein. In Zusammenarbeit mit dem Institut Technische Thermodynamik des KIT wurde die REDIM-Chemietabelle an den FASTEST-Code gekoppelt, welche unter Verwendung realer skalarer Dissipationsraten zu deutlich verbesserten Vorhersagen hinsichtlich des Kohlenmonoxids führte. Nachteilig erwies sich jedoch die Abhängigkeit von Vorwissen über die bestimmenden skalaren Dissipationsraten der zu simulierenden Konfiguration.

Im letzten Teil der Arbeit wurde die Entwicklung der HOQEGR-Chemietabelle vorgestellt. Diese wurde mit dem Ziel konzeptioniert, Vorhersagen von FWI-Szenarien unterschiedlicher skalarer Dissipationsraten zu ermöglichen ohne dabei konkretes Vorwissen über die zu simulierende Konfiguration zu nutzen. Hierzu wurde zunächst eine Potenzi-

alanalyse für ein Chemietabellierungskonzept durchgeführt, bei welchem die skalaren Dissipationsraten als direkte Kontrollvariablen verwendet werden. Hierbei wurde festgestellt, dass der chemische Zustand an einem Ort im Kontrollvariablenraum von den skalaren Dissipationsraten des gesamten Kontrollvariablenraums abhängt, wodurch sich eine Tabellierung dieser Art für eine universelle Anwendung der Tabelle ausschließt. Deshalb wurde stattdessen die direkte Tabellierung von räumlichen Detaillierten-Chemie-Ergebnissen als Tabellierungskonzept verwendet.

Zur Schaffung einer Datenbasis wurden eindimensionale transiente HOQ-Simulationen unter Verwendung des Smooke-Mechanismus verwendet. Durch die Variation des Abgasanteils bzw. durch Vorwärmen des Frischgases wurde neben der Orts-Zeit-Koordinate eine weitere Tabellendimension eingeführt. Die Kontrollvariablen Y_{CO_2} und Enthalpie h , die bereits im Kontext der FGM verwendet wurden, konnten dementsprechend um eine weitere Kontrollvariable ergänzt werden. Diese wurde unter Berücksichtigung der relevanten Kriterien durch den CO-Massenbruch definiert.

Die resultierende Chemietabelle wurde anhand der ihr zugrunde liegenden Detaillierten-Chemie-Simulation erfolgreich verifiziert. Schließlich wurde die Tabelle auf das laminare SWQ-Szenario angewendet, wobei sie verglichen mit Ergebnissen der Detaillierten Chemie gegenüber den Resultaten des FGM- und des REDIM-Modells die beste Vorhersage erzielte. Eine Analyse zeigte, dass die Rückkopplung des Kohlenmonoxids, welches während der SWQ-Simulation an die Wand diffundiert, dort im Rahmen des Tabellenzugriffs zu einem verstärkt negativen Quellterm des Kohlenmonoxids führt und damit eine bessere Vorhersage der wandnahen CO-Konzentration ermöglicht.

In anschließenden Arbeiten sollten nachfolgende Punkte adressiert werden:

1. Wie in Kapitel 5 erläutert wurde, kommt es beim turbulenten Betriebspunkt des SWQ-Brenners zu einer starken Variation des Enthalpiegradienten in der Verlöschzone. Diese Variation reicht von Nullgradienten der ungestörten adiabaten Flamme bis zu Gradienten, welche über die HOQ-Gradienten hinausgehen. Diese werden durch die HOQEGR-Tabelle grundsätzlich abgedeckt. Zur weiteren Prüfung der Leistungsfähigkeit dieser Tabelle stellen die Simulation und Analyse dieser Konfiguration einen weiteren wichtigen Schritt dar.
2. Die Wahl von Y_{CO} als Kontrollvariable basiert auf einer manuellen Überprüfung der in Abschnitt 5.3.1 beschriebenen Kriterien (1.-4.) für einzelne Speziesmassenbrüche. Mit Y_{CO} als Kontrollvariable konnte eine eindeutige Parametrisierung des gesamten Zustandsraums erzielt werden. Um die Abweichungen des chemischen Zustands im Kontrollvariablenraum zwischen verschiedenen Konfigurationen zu minimieren, ist jedoch ein systematisches Optimieren der Kontrollvariablen, wie in Abschnitt 5.3.1 beschrieben, nötig. Die Durchführung dieser Optimierung stellt einen sinnvollen Schritt bei der Weiterentwicklung der HOQEGR-Tabelle dar.
3. In dieser Arbeit wurde gezeigt, dass die wandnahe CO-Akkumulation durch einen diffusiven Transport entsteht. Diffusion ist jedoch ein Prozess, der nicht zur Bildung einer Spezies im globalen Sinne beiträgt. Für die Entwicklung realer Verbrennungsmaschinen ist jedoch die Schadstoffemission im Sinne einer Gesamtbilanz von Interesse. Eine Frage, die hierbei zu klären wäre, ist, inwieweit sich die FWI auf die Bildung von CO im abgekühlten Abgas auswirkt. Eine solche Untersuchung muss

im Rahmen eines Modells vorgenommen werden, welches mindestens den Transport von CO beinhaltet. Dies stellt somit einen interessanten Anwendungsfall zur weiteren Überprüfung der hier entwickelten HOQEGR-Tabelle dar.

4. Zur Erzeugung der Chemietabelle wurden eindimensionale HOQ-Simulationen verwendet, bei welchen durch die Abgasrückführungsrate sowie das Vorwärmen des Frischgases verschiedene Enthalpiegradienten realisiert wurden. Zur Realisierung der Variation von Enthalpiegradienten sind jedoch auch weitere Ansätze denkbar, welche in zukünftigen Arbeiten geprüft werden sollten. Beispielsweise ließe sich eine Aufteilung von Gradienten im Rahmen des HOQ-Szenarios durch Konvektion normal zur Wand realisieren. Hierbei könnten beispielsweise poröse Wände genutzt werden.

Anhang A

Transformation der Speziestransportgleichung in den Zustandsraum

Nachfolgend wird die Speziestransportgleichung entsprechend Gleichung 2.39 in den Kontrollvariablenraum transformiert, sodass sich die in Abschnitt 2.1.8 verwendete Gleichung 2.40 im Zustandsraum ergibt. Hierbei werden die Herleitung auf stationäre Probleme beschränkt und das Postulat

$$Y_k = Y_k(\mathcal{Y}, h) \quad (\text{A.1})$$

angenommen, welches voraussetzt, dass sich alle chemischen Zustände eindeutig durch die Kontrollvariable \mathcal{Y} und die Enthalpie h abbilden lassen. Hieraus lässt sich die Beziehung für die Gradienten entsprechend

$$\frac{\partial}{\partial x} () = \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathcal{Y}} () + \frac{\partial h}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial h} () \quad (\text{A.2})$$

ableiten. Zur Herleitung werden die Erhaltungsgleichungen für Masse, Enthalpie, Kontrollvariable und Spezies unter Annahme der Stationarität formuliert. Zur Übersichtlichkeit wird der Komponentenindex j der Raumrichtung weggelassen.

Massenerhaltung

Die Erhaltung der Masse entsprechend

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0 \quad (\text{A.3})$$

lässt sich unter Annahme von Stationarität als

$$\frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0 \quad (\text{A.4})$$

formulieren.

Erhaltung der Enthalpie

Die Erhaltung der Enthalpie unter der Annahme $\text{Lewis} = 1$ lässt sich entsprechend Gleichung 2.13 und Gleichung 2.34 als

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u h)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial h}{\partial x} \right), \quad (\text{A.5})$$

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + h \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \rho u \frac{\partial h}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial h}{\partial x} \right) \quad (\text{A.6})$$

notieren. Unter Annahme der Stationarität und Ausnutzung von Gleichung A.4 folgt

$$\rho u \frac{\partial h}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial h}{\partial x} \right). \quad (\text{A.7})$$

Nach Multiplikation von Gleichung A.7 mit $\frac{\partial Y}{\partial h}$ ergibt sich schließlich

$$\frac{\partial Y}{\partial h} \rho u \frac{\partial h}{\partial x} = \frac{\partial Y}{\partial h} \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial h}{\partial x} \right). \quad (\text{A.8})$$

Erhaltung der Kontrollvariablen \mathcal{Y}

Die Erhaltung der Kontrollvariablen entsprechend Gleichung 2.39 und

$$\frac{\partial \rho \mathcal{Y}}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u \mathcal{Y})}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x} \right) + \dot{\omega}_{\mathcal{Y}}, \quad (\text{A.9})$$

$$\frac{\partial \rho \mathcal{Y}}{\partial t} + \mathcal{Y} \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \rho u \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x} \right) + \dot{\omega}_{\mathcal{Y}} \quad (\text{A.10})$$

lässt sich unter Annahme der Stationarität und Ausnutzung von Gleichung A.4 als

$$\rho u \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x} \right) + \dot{\omega}_{\mathcal{Y}} \quad (\text{A.11})$$

notieren. Nach Multiplikation von A.11 mit $\frac{\partial Y}{\partial \mathcal{Y}}$ ergibt sich

$$\frac{\partial Y}{\partial \mathcal{Y}} \rho u \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x} = \frac{\partial Y}{\partial \mathcal{Y}} \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x} \right) + \frac{\partial Y}{\partial \mathcal{Y}} \dot{\omega}_{\mathcal{Y}}. \quad (\text{A.12})$$

Spezieserhaltungsgleichung

Analog zu Gleichung A.11 ergibt sich für die Spezies

$$\rho u \frac{\partial Y_k}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial Y_k}{\partial x} \right) + \dot{\omega}_{Y_k}. \quad (\text{A.13})$$

Konvektiver Term der Speziestransportgleichung

Der konvektive Term der Gleichung (A.13)

$$\rho u \frac{\partial Y_k}{\partial x} \quad (\text{A.14})$$

lässt sich unter Verwendung der Beziehung entsprechend Gleichung (A.2) zu

$$\rho u \left(\frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x} \frac{\partial Y_k}{\partial \mathcal{Y}} + \frac{\partial h}{\partial x} \frac{\partial Y_k}{\partial h} \right) \quad (\text{A.15})$$

und schließlich zu

$$\frac{\partial Y_k}{\partial \mathcal{Y}} \rho u \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x} + \frac{\partial Y_k}{\partial h} \rho u \frac{\partial h}{\partial x} \quad (\text{A.16})$$

umformulieren.

Diffusiver Term der Speziestranportgleichung

Der diffusive Term der Gleichung (A.13)

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial Y_k}{\partial x} \right) \quad (\text{A.17})$$

lässt sich unter Verwendung der Beziehung entsprechend Gleichung (A.2) zu

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \left[\frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x} \cdot \frac{\partial Y_k}{\partial \mathcal{Y}} + \frac{\partial h}{\partial x} \cdot \frac{\partial Y_k}{\partial h} \right] \right) \quad (\text{A.18})$$

und schließlich zu

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x} \cdot \frac{\partial Y_k}{\partial \mathcal{Y}} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial h}{\partial x} \cdot \frac{\partial Y_k}{\partial h} \right) \quad (\text{A.19})$$

umformulieren. Nach Anwenden der Produktregel ergibt sich

$$\begin{aligned} & \frac{\partial Y_k}{\partial \mathcal{Y}} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x} \right) + \rho D \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial Y_k}{\partial \mathcal{Y}} \right) \\ & + \frac{\partial Y_k}{\partial h} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \rho D \frac{\partial h}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial Y_k}{\partial h} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

Nach Einsetzen von Gleichung (A.2) in Gleichung (A.20) folgt

$$\begin{aligned} & = \frac{\partial Y_k}{\partial \mathcal{Y}} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x} \right) + \rho D \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x} \cdot \left[\frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathcal{Y}} \left(\frac{\partial Y_k}{\partial \mathcal{Y}} \right) + \frac{\partial h}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial h} \left(\frac{\partial Y_k}{\partial \mathcal{Y}} \right) \right] \\ & + \frac{\partial Y_k}{\partial h} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \rho D \frac{\partial h}{\partial x} \cdot \left[\frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathcal{Y}} \left(\frac{\partial Y_k}{\partial h} \right) + \frac{\partial h}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial h} \left(\frac{\partial Y_k}{\partial h} \right) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Nach der Zusammenfassung der partiellen Ableitungen

$$\begin{aligned}
&= \frac{\partial Y_k}{\partial \mathcal{Y}} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x} \right) + \rho D \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x} \cdot \left[\frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x} \cdot \left(\frac{\partial^2 Y_k}{\partial \mathcal{Y}^2} \right) + \frac{\partial h}{\partial x} \cdot \left(\frac{\partial^2 Y_k}{\partial h \partial \mathcal{Y}} \right) \right] \\
&+ \frac{\partial Y_k}{\partial h} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \rho D \frac{\partial h}{\partial x} \cdot \left[\frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x} \cdot \left(\frac{\partial^2 Y_k}{\partial \mathcal{Y} \partial h} \right) + \frac{\partial h}{\partial x} \cdot \left(\frac{\partial^2 Y_k}{\partial h^2} \right) \right]
\end{aligned} \tag{A.22}$$

und weiteren Umformungen ergibt sich schließlich

$$\begin{aligned}
&= \frac{\partial Y_k}{\partial \mathcal{Y}} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x} \right) + \frac{\partial Y_k}{\partial h} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial h}{\partial x} \right) \\
&+ \rho D \left(\frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x} \right)^2 \frac{\partial^2 Y_k}{\partial \mathcal{Y}^2} + 2\rho D \left(\frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x} \frac{\partial h}{\partial x} \right) \frac{\partial^2 Y_k}{\partial \mathcal{Y} \partial h} + \rho D \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 \frac{\partial^2 Y_k}{\partial h^2}.
\end{aligned} \tag{A.23}$$

Finale Speziestranportgleichung

Werden nun der Ausdruck für den konvektiven Term entsprechend Gleichung (A.16) sowie der diffusive Term entsprechend Gleichung (A.23) in die ursprüngliche Speziestransportgleichung entsprechend Gleichung (A.13) eingesetzt, so ergibt sich zunächst

$$\begin{aligned}
\frac{\partial Y_k}{\partial \mathcal{Y}} \rho u \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x} + \frac{\partial Y_k}{\partial h} \rho u \frac{\partial h}{\partial x} &= \frac{\partial Y_k}{\partial \mathcal{Y}} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x} \right) + \frac{\partial Y_k}{\partial h} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial h}{\partial x} \right) \\
&+ \rho D \left(\frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x} \right)^2 \frac{\partial^2 Y_k}{\partial \mathcal{Y}^2} + 2\rho D \left(\frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x} \frac{\partial h}{\partial x} \right) \frac{\partial^2 Y_k}{\partial \mathcal{Y} \partial h} + \rho D \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 \frac{\partial^2 Y_k}{\partial h^2} \\
&+ \dot{\omega}_{Y_k}.
\end{aligned} \tag{A.24}$$

Nach Subtraktion der Gleichungen (A.12) und (A.8) von Gleichung (A.24) ergibt sich schließlich die finale Form der Speziestransportgleichung im Kontrollvariablenraum mit

$$\begin{aligned}
0 &= \rho D \left(\frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x} \right)^2 \frac{\partial^2 Y_k}{\partial \mathcal{Y}^2} + 2\rho D \left(\frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x} \frac{\partial h}{\partial x} \right) \frac{\partial^2 Y_k}{\partial \mathcal{Y} \partial h} + \rho D \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 \frac{\partial^2 Y_k}{\partial h^2} \\
&+ \dot{\omega}_Y - \frac{\partial Y_k}{\partial \mathcal{Y}} \dot{\omega}_Y.
\end{aligned} \tag{A.25}$$

Anhang B

Konzeptskizze des Optimierungsproblems zur Bestimmung der Kontrollvariablen

Der Lösungsraum des Optimierungsproblems ist für die Einschränkung auf Linearkombinationen von N_s Spezies mit den Gewichten α_i gegeben. Die Kontrollvariable lässt sich mit

$$Y_x = \alpha_i \cdot Y_i \quad \text{mit } i = 1 \dots N_s \quad (\text{B.1})$$

notieren. Weiterhin lassen sich N_p Testpunkte \vec{y}_j im Kontrollvariablenraum mit

$$\vec{y}_j = [Y_{\text{CO}_2}, h, Y_x]_j^T \quad \text{mit } j = 1 \dots N_p \quad (\text{B.2})$$

definieren, die in geeigneter Weise verteilt werden sollten. Sie sollten so positioniert werden, dass alle Phasen des Flammenverlöschens und Wandabstände im Rahmen der Optimierung vertreten werden. Die Optimierung ließe sich dann als Minimierung der quadrierten Abweichungen zwischen den Zuständen der Tabelle und der Testkonfiguration (z. B. SWQ-Konfiguration) mit

$$\alpha_{i,\min} = \arg \min_{\alpha_i} \sqrt{\sum_{j=1}^{N_p} \left(Y_{k,\text{Tabelle}}(\vec{y}_j) - Y_{k,\text{TestKonf.}}(\vec{y}_j) \right)^2} \quad (\text{B.3})$$

formulieren.

Literaturverzeichnis

- [1] T.M. Alshaalan, C.J. Rutland, Turbulence, scalar transport, and reaction rates in flame-wall-interaction, *Proceedings of the Combustion Institute* 27 (1998) 793–799.
- [2] T.M. Alshaalan, C.J. Rutland, Wall heat flux in turbulent premixed reacting flow, *Combustion Science and Technology* 174 (2002) 135–165.
- [3] J.D. Anderson, *Fundamentals of Aerodynamics*, McGraw-Hill, New York, USA, fourth edition, 2007.
- [4] J. Andrae, P.B. Rnbom, L. Edsberg, L.E. Eriksson, A numerical study of side wall quenching with propane/air flames, *Proceedings of the Combustion Institute* 29 (2002) 789–795.
- [5] J.C.G. Andrae, T. Brinck, G.T. Kalghatgi, Hcci experiments with toluene reference fuels modeled by a semidetailed chemical kinetic model, *Combustion and Flame* 155 (2008) 696–712.
- [6] ANSYS, Inc., ANSYS ICEM CFD 15.0, 2017.
- [7] A. Avdic, *Development and Application of Numerical Methods for the Simulation of Advanced Combustion Processes within Complex Devices*, Ph.D. thesis, TU Darmstadt, 2014.
- [8] BP, *Statistical review of world energy* (2018).
- [9] G. Bruneaux, K. Akselvoll, T. Poinso, J. Ferziger, Flame-wall interaction simulation in a turbulent channel flow, *Combustion and Flame* 107 (1996) 27–44.
- [10] G. Bruneaux, T. Poinso, J.H. Ferziger, *Journal of fluid mechanics.*, volume 349, Cambridge University Press, 1997.
- [11] A. Burcat, *Thermochemical data for combustion calculations*, *Thermochemical Data for Combustion Calculations*, Springer, New York, 1984, pp. 455–473.
- [12] A. Burcat, W.C. Gardiner, *Ideal gas thermochemical data for combustion and air pollution use*, *Ideal Gas Thermochemical Data for Combustion and Air Pollution Use*, Springer, New York, 2000, pp. 489–538.
- [13] S.P. Burke, T.E.W. Schumann, Diffusion flames, *Industrial and Engineering Chemistry* 20 (1928) 998–1005.
- [14] V. Bykov, U. Maas, The extension of the ildm concept to reaction diffusion manifolds, *Combustion Theory and Modelling* 11 (2007) 839–862.

- [15] M. Chauvy, B. Delhom, J. Reveillon, F.X. Demoulin, Flame/Wall Interactions: Laminar Study of Unburnt HC Formation, Flow, Turbulence and Combustion 84 (2010) 369–396.
- [16] CHEM1D, A one-dimensional laminar flame code, developed at Eindhoven University of Technology, www.combustion.tue.nl/chem1d.
- [17] A.J. Chorin, Numerical solution of the Navier-Stokes equations, Mathematics of Computation 22 (1968) 745–762.
- [18] R. Courant, K. Friedrichs, H. Lewy, Ueber die partiellen differenzengleichungen der mathematischen physik, Mathematische Annalen 100 (1928) 32–74.
- [19] Deutsches Institut für Medizinische Dokumentation und Information, ICD-10-WHO 2019, 2019.
- [20] A. Dreizler, B. Böhm, Advanced laser diagnostics for an improved understanding of premixed flame-wall interactions, Proceedings of the Combustion Institute 35 (2015) 37–64.
- [21] F. Durst, M. Schaefer, A parallel blockstructured multigrid method for the prediction of incompressible flows, International Journal for Numerical Methods in Fluids 22 (1996) 549–565.
- [22] A. Eckbreth, Laser diagnostics for combustion temperature and species, 1996.
- [23] O. Ezekoye, R. Greif, R. Sawyer, Increased surface temperature effects on wall heat transfer during unsteady flame quenching, Symposium (International) on Combustion 24 (1992) 1465–1472.
- [24] J.H. Ferziger, M. Perić, Computational Methods for Fluid Dynamics, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2002.
- [25] J.H. Ferziger, M. Peric, Numerische Stroemungsmechanik, Springer, Berlin, Germany, first edition, 2007.
- [26] A. Fick, Ueber Diffusion, Annalen der Physik und Chemie 170 (1855) 59–86.
- [27] S. Ganter, A. Heinrich, T. Meier, G. Kuenne, C. Jainski, M.C. Reißmann, A. Dreizler, J. Janicka, Numerical analysis of laminar methane–air side-wall-quenching, Combustion and Flame 186 (2017) 299–310.
- [28] S. Ganter, C. Straßacker, G. Kuenne, T. Meier, A. Heinrich, U. Maas, J. Janicka, Laminar near-wall combustion: Analysis of tabulated chemistry simulations by means of detailed kinetics, International Journal of Heat and Fluid Flow 70 (2018) 259–270.
- [29] O. Gicquel, N. Darabiha, D. Thevenin, Laminar premixed hydrogen/air counter-flow flame simulations using flame prolongation of ILDM with differential diffusion, Proceedings of the Combustion Institute 28 (2000) 1901–1908.
- [30] I. Glassman, Combustion, Academic Press, San Diego, USA, third edition, 1996.

- [31] A. Gruber, J.H. Chen, D. Valiev, C.K. Law, Direct numerical simulation of premixed flame boundary layer flashback in turbulent channel flow, *Journal of Fluid Mechanics* 709 (2012) 516–542.
- [32] A. Gruber, A.R. Kerstein, D. Valiev, C.K. Law, H. Kolla, J.H. Chen, Modeling of mean flame shape during premixed flame flashback in turbulent boundary layers, *Proceedings of the Combustion Institute* 35 (2015) 1485–1492.
- [33] A. Gruber, R. Sankaran, E.R. Hawkes, J.H. Chen, Turbulent flame–wall interaction: A direct numerical simulation study, *Journal of Fluid Mechanics* 658 (2010) 5–32.
- [34] F. Hahn, Zur Vorhersage technischer Verbrennungssysteme im Hinblick auf fluessige Brennstoffe, Ph.D. thesis, TU-Darmstadt, Darmstadt, 2008.
- [35] F. Hahn, C. Olbricht, J. Janicka, Study of various configurations under variable density mixing conditions aiming on gas turbine combustion using LES, *ASME Turbo Expo Conference Proceedings* (2008) GT2008–50268 pp. 155–165.
- [36] F. Ham, An efficient scheme for large eddy simulation of low ma combustion in complex configurations, in: *Proceedings of the Summer Program 2007*, Center for Turbulence Research, pp. 41–45.
- [37] C. Hasse, M. Bollig, N. Peters, H. Dwyer, Quenching of laminar iso-octane flames at cold walls, *Combustion and Flame* 122 (2000) 117–129.
- [38] A. Heinrich, Turbulente, chemisch reagierende Strömungen: Wandnahe Simulationen, Ph.D. thesis, TU Darmstadt, Aachen, 2018.
- [39] A. Heinrich, S. Ganter, G. Kuenne, C. Jainski, a. Dreizler, J. Janicka, 3D Numerical Simulation of a Laminar Experimental SWQ Burner with Tabulated Chemistry, *Flow, Turbulence and Combustion* (2017) 1–25.
- [40] A. Heinrich, G. Kuenne, S. Ganter, C. Hasse, J. Janicka, Investigation of the Turbulent Near Wall Flame Behavior for a Sidewall Quenching Burner by Means of a Large Eddy Simulation and Tabulated Chemistry, *Fluids* 3 (2018) 65.
- [41] A. Heinrich, F. Ries, G. Kuenne, S. Ganter, C. Hasse, A. Sadiki, J. Janicka, Large eddy simulation with tabulated chemistry of an experimental sidewall quenching burner, *Heat and Fluid Flow* (2017).
- [42] J.O. Hirschfelder, C.F. Curtis, R.B. Bird, *Molecular Theory of Gases and Liquids*, John Wiley & Sons, Hoboken, USA, 1954.
- [43] Intergovernmental Panel of Climate Change, *Climate change 2014 - synthesis report* (2014).
- [44] International Energy Agency, *Key world energy statistics* (2018).
- [45] International Energy Agency, *World energy outlook 2018* (2018).

- [46] C. Jainski, Experimentelle Untersuchung der turbulenten Flamme-Wand-Interaktion, Ph.D. thesis, Technische Universität Darmstadt, 2016.
- [47] C. Jainski, M. Reißmann, B. Böhm, A. Dreizler, Experimental investigation of flame surface density and mean reaction rate during flame-wall interaction, *Proceedings of the Combustion Institute* 36 (2017) 1827–1834.
- [48] C. Jainski, M. Reißmann, B. Böhm, J. Janicka, A. Dreizler, Sidewall quenching of atmospheric laminar premixed flames studied by laser-based diagnostics, *Combustion and Flame* 183 (2017) 271–282.
- [49] A. Ketelheun, Development of Tabulated Chemistry Methods for the Accurate Simulation of Turbulent Combustion Systems, Ph.D. thesis, TU Darmstadt, 2014.
- [50] A. Ketelheun, G. Kuenne, J. Janicka, Heat Transfer Modeling in the Context of Large Eddy Simulation of Premixed Combustion with Tabulated Chemistry, *Flow, Turbulence and Combustion* 91 (2013) 867–893.
- [51] A. Ketelheun, C. Olbricht, F. Hahn, J. Janicka, Premixed generated manifolds for the computation of technical combustion systems, *ASME Turbo Expo Conference Proceedings* (2009) 695–705.
- [52] A. Ketelheun, C. Olbricht, F. Hahn, J. Janicka, Premixed generated manifolds for the computation of technical combustion systems, Premixed generated manifolds for the computation of technical combustion systems, *ASME Turbo Expo Conference Proceedings*, 2009, pp. 695–705.
- [53] M. Klein, A. Sadiki, J. Janicka, A digital filter based generation of inflow data for spatially developing direct numerical or large eddy simulations, *Journal of Computational Physics* 186 (2003) 652–665.
- [54] G. Kuenne, A. Ketelheun, J. Janicka, LES modeling of premixed combustion using a thickened flame approach coupled with FGM tabulated chemistry, *Combustion and Flame* 158 (2011) 1750–1767.
- [55] G. Künne, Large eddy simulation of premixed combustion using artificial flame thickening coupled with tabulated chemistry, Ph.D. thesis, TU-Darmstadt, Darmstadt, 2012.
- [56] W. Lazik, T. Doerr, S. Bake, R. v. d. Bank, L. Rackwitz, Development of Lean-Burn Low-NOx combustion technology at Rolly-Royce deutschland, *ASME Turbo Expo Conference Proceedings* (2008) 797–807.
- [57] T. Lehnhaeuser, M. Schaefer, Improved linear interpolation practice for finite-volume schemes on complex grids, *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 38 (2002) 625–645.
- [58] H. Leister, Numerische Simulation dreidimensionaler, zeitabhängiger Strömungen unter dem Einfluss von Auftriebs- und Trägheitskräften, Ph.D. thesis, Universität Erlangen-Nürnberg, Erlangen, 1994.

- [59] H. Leister, M. Peric, Vectorized strongly implicit solving procedure for a seven-diagonal coefficient matrix, *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow* 4 (1994) 159–172.
- [60] U. Maas, V. Bykov, The extension of the reaction diffusion manifold concept to systems with detailed transport models, *Proceedings of the Combustion Institute* 33 (2011) 1253–1259.
- [61] U. Maas, S. Pope, Simplifying chemical kinetics: Intrinsic low-dimensional manifolds in composition space, *Combustion and Flame* 88 (1992) 239–264.
- [62] A. Majda, J. Sethian, The derivation and numerical solution of the equations for zero mach number combustion, *Combustion Science and Technology* 42 (1985) 185–205.
- [63] A. Maltsev, Towards the Development and Assessment of Complete CFD Models for the Simulation of Stationary Gas Turbine Combustion Process, Ph.D. thesis, TU-Darmstadt, Darmstadt, 2003.
- [64] M. Mann, Laserbasierte Untersuchung der Flamme-Wand-Interaktion, Ph.D. thesis, Technische Universität Darmstadt, 2013.
- [65] M. Mann, C. Jainski, M. Euler, B. Böhm, A. Dreizler, Transient flame–wall interactions: Experimental analysis using spectroscopic temperature and CO concentration measurements, *Combustion and Flame* 161 (2014) 2371–2386.
- [66] MathWorks Incorporation, Curve fitting toolbox 1: user’s guide, MathWorks, 2006.
- [67] G.S. McBride, B. J., M.A. Reno, Coefficients for Calculating Thermodynamic and Transport Properties of Individual Species, Technical Report NASA-TM-4513, National Aeronautics and Space Administration, 1993.
- [68] T. Meier, Entwicklung numerischer Methoden zur Anwendung detaillierter Chemie in komplexen Verbrennungssystemen, Ph.D. thesis, Technische Universität Darmstadt, 2017.
- [69] C.E. Mortimer, U. Mueller, *Chemie. Das Basiswissen der Chemie.*, Thieme, Stuttgart, Germany, eighth edition, 2003.
- [70] A. Neagos, V. Bykov, U. Maas, Adaptive hierarchical construction of reaction diffusion manifolds for simplified chemical kinetics, *Proceedings of the Combustion Institute* 36 (2017) 663–672.
- [71] P.D. Nguyen, L. Vervisch, V. Subramanian, P. Domingo, Multidimensional flamelet-generated manifolds for partially premixed combustion, *Combustion and Flame* 157 (2009) 43–61.
- [72] J.A. Oijen, Flamelet-generated manifolds : development and application to premixed laminar flames, Ph.D. thesis, Technische Universiteit Eindhoven, 2002.

- [73] J.A. van Oijen, L.P.H. de Goey, Modelling of premixed laminar flames using Flamelet-Generated manifolds, *Combustion Science and Technology* 161 (2000) 113–137.
- [74] C. Olbricht, Numerische Berechnung technischer Verbrennungssysteme, Ph.D. thesis, TU-Darmstadt, Darmstadt, 2008.
- [75] C. Olbricht, F. Hahn, A. Ketelheun, J. Janicka, Pdf modeling strategies for LES of a bluff-body stabilized swirl combustor using premixed generated manifolds, in: *Turb. Shear Flow Phenom.* 6. Soul, Korea.
- [76] C. Olbricht, F. Hahn, A. Ketelheun, J. Janicka, Strategies for presumed PDF modeling for LES with premixed flamelet-generated manifolds, *Journal of Turbulence* 11 (2010).
- [77] P. Pantangi, Large Eddy Simulation of Mixing and Combustion in Combustion Systems under Non-adiabatic Conditions, Ph.D. thesis, Technische Universität Darmstadt, 2017.
- [78] P. Pantangi, A. Sadiki, J. Janicka, M. Mann, A. Dreizler, LES of premixed methane flame impinging on the wall using non-adiabatic flamelet generated manifold (FGM) approach, volume 92, 2014.
- [79] S. Patankar, D. Spalding, A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 15 (1972) 1787–1806.
- [80] P. Paul, J. Warnatz, A re-evaluation of the means used to calculate transport properties of reacting flows, *Symposium (International) on Combustion* 27 (1998) 495–504.
- [81] M. Peric, A finite volume method for the prediction of three-dimensional fluid flow in complex ducts, Ph.D. thesis, Imperial College, London, 1985.
- [82] N. Peters, Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion, *Progress in Energy and Combustion Science* 10 (1984) 319–339.
- [83] N. Peters, Laminar flamelet concepts in turbulent combustion, *Symposium (International) on Combustion* 21 (1986) 1231–1250.
- [84] N. Peters, *Turbulent Combustion*, Cambridge University Press, 1 edition, 2000.
- [85] T. Poinso, D. Veynante, *Theoretical and Numerical Combustion*, R. T. Edwards, Philadelphia, USA, second edition, 2005.
- [86] T. Poinso, D. Veynante, *Theoretical and Numerical Combustion*, R. T. Edwards, Philadelphia, USA, second edition, 2005.
- [87] P. Popp, M. Baum, Analysis of wall heat fluxes, reaction mechanisms, and unburnt hydrocarbons during the head-on quenching of a laminar methane flame, *Combustion and Flame* 108 (1997) 327–348.

-
- [88] P. Popp, M. Smooke, M. Baum, Heterogeneous/homogeneous reaction and transport coupling during flame-wall interaction, Symposium (International) on Combustion 26 (1996) 2693–2700.
- [89] K. Radhakrishnan, A.C. Hindmarsh, Description and use of LSODE, the Livermore Solver for Ordinary Differential Equations (1993).
- [90] P. Rauwoens, J. Vierendeels, E. Dick, B. Merci, A conservative discrete compatibility-constraint low-Mach pressure-correction algorithm for time-accurate simulations of variable density flows, Journal of Computational Physics 228 (2009) 4714–4744.
- [91] O. Reynolds, An experimental investigation of the circumstances which determine whether the motion of water shall be direct or sinuous, and of the law of resistance in parallel channels., Proceedings of the Royal Society of London 35 (1883) 84–99.
- [92] O. Reynolds, On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion, Philosophical Transactions of the Royal Society of London 186 (1895) pp. 123–164.
- [93] C.M. Rhie, W.L. Chow, Numerical study of the turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation, AIAA Journal 21 (1983) 1525–1532.
- [94] K. Richter, R. Friedrich, L. Schmitt, Large eddy simulation of turbulent wall boundary layers with pressure gradient, in: Turb. Shear Flow Phenom. 6. Toulouse, France.
- [95] M. Schaefer, Computational Engineering - Introduction to Numerical Methods, Springer, Berlin, Germany, 2006.
- [96] C. Schneider, A. Dreizler, J. Janicka, Fluid dynamical analysis of atmospheric reacting and isothermal swirling flows, Flow Turbulence and Combustion 74 (2005) 103–127.
- [97] A. Scholtissek, P. Domingo, L. Vervisch, C. Hasse, A self-contained progress variable space solution method for thermochemical variables and flame speed in freely-propagating premixed flamelets, Proceedings of the Combustion Institute (2018).
- [98] J.M. Seitzman, J. Haumann, R.K. Hanson, Quantitative two-photon LIF imaging of carbon monoxide in combustion gases, Applied Optics 26 (1987) 2892.
- [99] L. Shunn, F. Ham, Consistent and accurate state evaluations in variable density flow simulations, in: Proceedings of the Summer Program 2006, Center for Turbulence Research, pp. 135–147.
- [100] G.P. Smith, D.M. Golden, M. Frenklach, N.W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C.T. Bowman, R.K. Hanson, S. Song, W.C. Gardiner, V.V. Lissianski, Z. Qin, GRI-MECH 3.0, 1999.
- [101] M. Smooke, Reduced kinetic mechanisms and asymptotic approximations for methane-air flames a topical volume, Springer, Berlin, Germany, 1991.

- [102] M.D. Smooke, V. Giovangigli, Formulation of the premixed and nonpremixed test problems, in: M.D. Smooke (Ed.), *Reduced Kinetic Mechanisms and Asymptotic Approximations for Methane-Air Flames*, volume 384, Springer, Berlin, Germany, 1991, pp. 1–28.
- [103] B. Somers, The simulation of flat flames with detailed and reduced chemical models, Ph.D. thesis, Technische Universiteit Eindhoven, 1994.
- [104] J.H. Spurk, *Stroemungslehre: Einfuehrung in die Theorie der Stroemungen*, Springer, Berlin, Germany, seventh edition, 2007.
- [105] J. Stefan, *Sitzungsberichte Akad. Wiss. Wien II* 68 (1874) 325.
- [106] G. Steinhilber, U. Maas, Reaction-diffusion manifolds for unconfined, lean premixed, piloted, turbulent methane-air systems, *Proceedings of the Combustion Institute* 34 (2013) 217–224.
- [107] P. Stephan, K. Schaber, K. Stephan, F. Mayinger, *Thermodynamik, Band 1 : Ein-stoffsysteme*, Springer, Berlin, Germany, seventeenth edition, 2007.
- [108] H.L. Stone, Iterative solution of implicit approximations of multidimensional partial differential equations, *SIAM Journal on Numerical Analysis* 5 (1968) 530–558.
- [109] C. Straßacker, V. Bykov, U. Maas, Redim reduced modeling of quenching at a cold wall with heterogeneous wall reactions, *Heat and Fluid Flow* (2017). (Unpublished result, this issue).
- [110] US Energy Information Administration, *Annual enery outlook 2018* (2018).
- [111] J. Warnatz, U. Maas, R.W. Dibble, *Combustion*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, fourth edition, 2006.
- [112] G. Wedler, *Lehrbuch der physikalischen Chemie*, Wiley-VCH, 2004.
- [113] B. Wegner, A Large-Eddy Simulation Technique for the Prediction of Flow, Mixing and Combustion in Gas Turbine Combustors, Ph.D. thesis, TU-Darmstadt, Darmstadt, 2006.
- [114] F.A. Williams, *Combustion theory : The fundamental theory of chemically reacting flow systems*, The Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc, Menlo Park, California, second edition, 1985.
- [115] J.H. Williamson, Low-storage Runge-Kutta schemes, *Journal of Computational Physics* 35 (1980) 48–56.
- [116] Y.B. Zel'dovich, K teorii goreniya nepereme shannnykh gazov (ön the theory of combustion of initially unmixed gases"), *Zhurnal Tekhnicheskoi Fiziki* 19 (1949) 1199–1210.
- [117] G. Zhou, L. Davidson, E. Olsson, Transonic inviscid/turbulent airfoil flow simulations using a pressure based method with high order schemes, in: *Fourteenth International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics*, 1995, pp. 372–378.

Lebenslauf

Persönliche Daten

Sebastian Ganter, geb. am 10.12.1987 in Freiburg im Breisgau

Schule

08/1998–06/2007 Markgräfler Gymnasium in Müllheim (Baden)
Leistungskurse: Physik und Geographie
06/2007 Allgemeine Hochschulreife

Grundwehrdienst

10/2007–06/2008 Grundausbildung im 6./Jägerbataillon 292 in Meßstetten
Stabsdienst im Deutsch-Französischen Versorgungsbataillon
in Müllheim (Baden)

Studium

10/2008–04/2014 Technische Universität Darmstadt
Studiengang: Allgemeiner Maschinenbau
Schwerpunkte:

- Energietechnik
- Strömungsmechanik
- Turbomaschinen und Flugantriebe
- Thermodynamik
- Kernenergie
- Quantenmechanik

09/2011 B. Sc. Maschinenbau - MPE
04/2014 M. Sc. Maschinenbau - MPE

Berufstätigkeit/Promotion

05/2014–heute Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Fachgebiet für Energie- und Kraftwerkstechnik der Technischen Universität Darmstadt